



OSCAR NÉSTOR VENTURA PÉREZ

Dr.

onv@fq.edu.uy

<http://ccbg.fq.edu.uy>

CCBG, DETEMA, Facultad de Química, UdeLaR, Avda. Gral. Flores 2124, CC1157, 11800 Montevideo, Uruguay
y
+59899501368

SNI

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

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

Datos Generales

INSTITUCIÓN PRINCIPAL

Universidad de la República/ Facultad de Química - UDeLaR/ CCBG - DETEMA / Uruguay

DIRECCIÓN INSTITUCIONAL

Institución: Universidad de la República / Facultad de Química - UDeLaR / Sector Educación Superior/Público
Dirección: CCBG DETEMA / Avenida General Flores 2124 / cc 1157 / 11800 / Montevideo, Montevideo, Uruguay
Teléfono: (598) 29248396
Correo electrónico/Sitio Web: onv@fq.edu.uy <http://ccbg.fq.edu.uy>

Formación

Formación académica

CONCLUIDA

DOCTORADO

Doctorado en Química (1983 - 1984)

Universidad de la República - Facultad de Química - UDeLaR, Uruguay
Título de la disertación/tesis: Estudio químico cuántico de la importancia de los complejos de enlace de hidrógeno en la reactividad química
Tutor/es: Ramón M. Sosa
Obtención del título: 1993
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional

MAESTRÍA

Magister en Química (1981 - 1982)

Universidad de la República - Facultad de Química - UDeLaR, Uruguay
Título de la disertación/tesis: Estudios sobre bioquímica cuántica. La teoría electrónica del cáncer y aspectos relacionados
Tutor/es: Ramón M. Sosa
Obtención del título: 1982
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional

GRADO

Bachiller en Química (1975 - 1981)

Universidad de la República - Facultad de Química - UDeLaR, Uruguay
Título de la disertación/tesis:
Obtención del título: 1981
Palabras Clave: Química
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica /

Formación complementaria

CONCLUIDA

POSDOCTORADOS

(1984 - 1985)

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

Areas de conocimiento:

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

CURSOS DE CORTA DURACIÓN

Teoremas Hiperviriales (01/1981 - 01/1981)

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

10 horas

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química / Física Molecular

Curso Avanzado de Química Teórica (01/1981 - 01/1981)

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

10 horas

Metodología Hartree-Fock (01/1981 - 01/1981)

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

10 horas

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química / Física Molecular

Idiomas

Alemán

Entiende bien / Habla bien / Lee bien / Escribe bien

Español

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

Francés

Entiende bien / Lee bien /

Inglés

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

CIENCIAS NATURALES Y EXACTAS

Ciencias de la Tierra y relacionadas con el Medio Ambiente / Ciencias Medioambientales / Riles, Efluentes, Tratamientos de agua

Actuación profesional

Facultad de Química - UDeLaR

VÍNCULOS CON LA INSTITUCIÓN

Funcionario/Empleado (01/1977 - a la fecha)

Profesor catedrático efectivo ,40 horas semanales / Dedicación total
Cátedra de Química Cuántica

Funcionario/Empleado (01/1989 - 12/1997)

Profesor agregado ,40 horas semanales / Dedicación total
Química Cuántica

Funcionario/Empleado (01/1986 - 12/1989)

Profesor agregado ,40 horas semanales
Química Cuántica

Funcionario/Empleado (01/1985 - 12/1986)

Asistente interino ,20 horas semanales
Químico-Física

ACTIVIDADES

PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN Y DESARROLLO

Nanotransductores en procesos celulares de señales redox efectuadas por especies reactivas de oxígeno. Óxido-reducción de residuos con azufre y selenio en proteínas, inhibidores y biomiméticos involucrados en los procesos de regulación redox (04/2011 - 03/2015)

La propuesta consiste en apuntalar diversas líneas de investigación convergentes en un programa de enzimología computacional. Si bien el programa se plantea para financiamiento a 48 meses, las provisiones de equipamiento, formación de capital computacional y recursos humanos, dentro de una temática novedosa y relativamente poco desarrollada, apunta a un programa a largo plazo (10-15 años) donde naturalmente las líneas de investigación irán mutando de acuerdo al conocimiento generado. El centro temático de la propuesta es el funcionamiento de ROS, específicamente H₂O₂ como mensajero secundario que afecta la actividad y conformación de enzimas involucradas en la reparación de oxidación de proteínas. Las enzimas a estudiarse funcionan todas por oxidación de azufre a disulfuro, sulfóxidos, sulfenos, sulfinos, sulfonas (y las especies equivalentes para selenio). No todas las enzimas involucradas en el proceso de oxidación de tioles van a ser investigadas en este programa, sino que se eligieron algunas en particular, que presentan características interesantes y novedosas. Desde el punto de vista temático, el interés de este proyecto descansa en dos aspectos. Por un lado, el hecho de que para las enzimas que proponemos estudiar, los mecanismos de acción detallados, así como las variables fisicoquímicas que los afectan no son completamente conocidas a nivel molecular. Por otro lado, el estudio de inhibidores y biomiméticos nos permite una aproximación biotecnológica hacia la fabricación de enzimas artificiales para actuar, por ejemplo, como antioxidantes sintéticos o reaccionar a las señales de aumento de concentración de H₂O₂. Las siguientes son las líneas de investigación. a) Desarrollo de software de bioinformática estructural. b) Investigación de reacciones químicas en medio acuoso a distintos pH, para determinar estructuras, interacciones, espectros y propiedades energéticas de las reacciones orgánicas que están en el centro del proceso catalítico, pero realizadas sobre modelos en solución acuosa. c) Investigación de reactivos para reconocimiento de sulfinos y sulfonas, para intentar obtener compuestos que reaccionen más fácilmente con estos que con sulfenos, para usar como reactivos de reconocimiento específico. d) Investigación sobre biomiméticos, moléculas simples (complejos metálicos o macrociclos orgánicos) que mimtican la acción de la Gpx. e) Investigaciones sobre complejos metálicos de Cys, HCys y Sec, para entender el efecto catalítico de los iones Zn⁺² y Cu⁺² en interacción con los tioles, y cómo modifica esta interacción la oxidabilidad de los tioles (o selenoles) unidos a él. f) Investigaciones sobre PTP1B (fosforilación y oxidación por H₂O₂) para entender su inactivación reversible e irreversible, en particular en sus reacciones con H₂O₂, investigando su estabilidad en el tiempo mediante cálculos QM/MM de dinámica molecular. g) Investigaciones sobre el complejo peroxiredoxina/sulfiredoxina para comprender la importancia de la transformación sulfénico/sulfínico como señal celular y de qué manera se evita la inactivación irreversible. h) Investigaciones sobre Betaína-homocisteína S-metiltransferasa y Methiona-R-sulfóxido reductasas para determinar las estructuras y la energética del mecanismo de transferencia de metilo a la HCys, la oxidación de Met a MetSo y la reducción enantiomérica de la

misma, considerando la diferencia de eficiencia entre Cys y Sec. i) Investigaciones sobre mutación de Cys con HCys y Sec.

20 horas semanales

Facultad de Química, CCBG, DETEMA

Investigación

Coordinador o Responsable

En Marcha

Alumnos encargados en el proyecto:

Pregrado:1

Especialización:1

Maestría/Magister:1

Doctorado:2

Financiación:

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

Equipo: SAENZ-MENDEZ, P., BOTTINELLI, F., E. BERMUDEZ, KIENINGER, M., VEGA-TEIJIDO, M., IRVING, K, K, SEGOVIA, M.

Palabras clave: bioquímica computacional proteínas Química computacional tioles

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química / Química computacional

Formación de dioxinas en la combustión : visión micro, meso y macro (01/2005 - 01/2010)

10 horas semanales

Cátedra de Química Cuántica

Desarrollo

Coordinador o Responsable

Concluido

Alumnos encargados en el proyecto:

Doctorado:1

Financiación:

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

Equipo: SEGOVIA, MARC EDUARDO (Responsable)

Structural bioinformatics: obtaining 3D models of short bioactive peptides from multiple sequences using Feedback Restrained Molecular Dynamics (01/2004 - 12/2004)

Cátedra de Química Cuántica

Desarrollo

En Marcha

Financiación:

Institución del exterior, Apoyo financiero

Equipo: KIENINGER, MARTINA (Responsable)

Estudio computacional de la activación de oxígeno molecular en complejos mono y binucleares de Fe y Cu con importancia biológica (01/2000 - 12/2002)

Proyecto financiado por CSIC, US\$ 20.000

Cátedra de Química Cuántica

Desarrollo

En Marcha

Equipo: KIENINGER, MARTINA (Responsable)

Estudio computacional de la Química Atmosférica de los radicales CF3O: una contribución a las transformaciones de los hidrofluorocarbonos en la atmósfera (01/1997 - 12/1999)

Cátedra de Química Cuántica

Desarrollo

En Marcha

Financiación:

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

Equipo: SEGOVIA, MARC EDUARDO (Responsable)

Study of intramolecular proton transfer in excited states of hydrogen bonded molecules (01/1995 - 12/1997)

Proyecto en cooperación con Alemania, España y Polonia, financiado por la Comunidad Económica Europea (US\$ 480.000) y el BID (US\$ 190.000). Financiador(es): Universidad de La República -

UDELAR (Cooperación); Max Planck Institut Fur Physik Und Astrophysik Garching - MPA (Cooperación); Universitat Autònoma de Girona - U.A.G. (Cooperación); Universidad de Poznan - UP (Cooperación); Universidad de Wrocław - UW (Cooperación); Universidad de Torun - UT (Cooperación); Comisión de Las Comunidades Europeas - C.C.E.E. (Apoyo financiero); Banco Interamericano de Desarrollo - BID (Apoyo financiero)

Cátedra de Química Cuántica

Desarrollo

En Marcha

Equipo: DIERCKSEN, GEERD H.F. , KARWOWSKI, JACEK , BANCEWICZ, MALGORZATA , DURAN I PORTAS, MIQUEL , SOSA, RAMÓN M. , LATAJKA, ZDZISLAW

Construcción de memorias moleculares multifotónicas: estudio de los procesos básicos (01/1993 - 12/1996)

Proyecto financiado por el Instituto de Cooperación Iberoamericana, US\$ 20.000. Financiador(es): Universidad de La República - UDELAR (Cooperación); Universitat Autònoma de Girona - U.A.G. (Cooperación); Instituto de Cooperación Iberoamericana - ICI (Apoyo financiero)

Cátedra de Química Cuántica

Desarrollo

En Marcha

Equipo: DURAN I PORTAS, MIQUEL

Estudio teórico de reacciones de descomposición de ozono en la atmósfera (01/1993 - 12/1994)

Proyecto en cooperación con Brasil y Polonia. Parte uruguaya financiada por la Comisión Sectorial de Investigación Científica, UDELAR, US\$ 15.000. Financiador(es): Universidad de La República - UDELAR (Cooperación); Universidade de São Paulo - USP; Universidad de Wrocław - UW

Cátedra de Química Cuántica

Desarrollo

En Marcha

Equipo: LATAJKA, ZDZISLAW , CANUTO, SYLVIO

Static and dynamic aspects of the solvent influence on reactions involving transformation of the aldehyde group with applications to enzymatic processes (01/1990 - 12/1994)

Cátedra de Química Cuántica

Desarrollo

En Marcha

Equipo: TOMASI, JACOPO

Estudio computacional de complejos de enlace de hidrógeno neutros en estados excitados e ionizados (01/1991 - 12/1993)

Cátedra de Química Cuántica

Desarrollo

En Marcha

Equipo: DIERCKSEN, GEERD H.F.

Ab initio and laser-spectroscopical study of hydrogen- bonded clusters in free jets (01/1989 - 12/1992)

Financiador(es): Universidad de La República - UDELAR (Cooperación); Universidad Autònoma de Barcelona - U.A.B. (Cooperación); Universitat Heidelberg (Ruprecht-Karls) - R.K.U.H.* (Cooperación); Max Planck Institut Fur Physik Und Astrophysik Garching - MPA (Cooperación); Comisión de Las Comunidades Europeas - C.C.E.E. (Apoyo financiero).

Cátedra de Química Cuántica

Investigación

Concluido

Alumnos encargados en el proyecto:

Maestría/Magister:2

Equipo: DIERCKSEN, GEERD H.F. , BERTRAN, JUAN

Theoretical and experimental pharmacological approach to Chagas disease: specific action o new drugs against Tripanothione Reductase with low Glutathione Reductase inactivation-related toxicity (01/1989 - 12/1991)

Cátedra de Química Cuántica

Desarrollo

En Marcha

Equipo: PAULINO, MARGOT

Estudio Teórico sobre Catálisis Heterogénea: Mecanismos de Reacciones Químicas Importantes para la Obtención de Energía a Bajo Costo (01/1982 - 01/1983)

Cátedra de Química Cuántica
Desarrollo
En Marcha
Equipo: SOSA, RAMÓN M.

DIRECCIÓN Y ADMINISTRACIÓN

Director de unidad (02/1999 - 03/2002)

Cátedra de Química Cuántica

Director de unidad (01/1991 - 05/1992)

Cátedra de Química Cuántica

Director del Instituto de Química (01/1990 - 05/1992)

DOCENCIA

Química (07/2004 - 11/2004)

Grado

Asignaturas:
Fisicoquímica Molecular Básica, horas

Química (03/2004 - 07/2004)

Grado

Asignaturas:
Introducción a la Bioinformática, horas

Química (07/2003 - 11/2003)

Grado

Asignaturas:
Mecánica Cuántica, horas
Química Computacional, horas

Química (03/2002 - 07/2002)

Grado

Asignaturas:
Fisicoquímica Molecular Básica, horas

Química (07/2000 - 07/2000)

Grado

Asignaturas:
Modelado Molecular, horas

Química (04/1999 - 07/1999)

Grado

Asignaturas:
Modelado Molecular, horas

Química (01/1999 - 06/1999)

Grado

Asignaturas:
Química Cuántica, horas

Química (11/1998 - 01/1999)

Grado

Asignaturas:
Química Cuántica, horas

Química (04/1998 - 07/1998)

Grado

Asignaturas:
Modelado Molecular, horas

EXTENSIÓN

Divulgación científica en contaminación ambiental (12/2007 - 12/2011)

Facultad de Química, CCBG, DETEMA
5 horas

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Tierra y relacionadas con el Medio Ambiente /
Ciencias Medioambientales / Contaminación

CAPACITACIÓN/ENTRENAMIENTOS DICTADOS

(01/2005 - 12/2005)

BADENES, María Paula. Estudios sobre reacciones químicas de dioxinas. Estudiante de Postdoctorado enviada por Carlos J. Cobos del INIFTA para trabajar durante un año en Montevideo

(01/1998 - 12/1998)

JORGE, Nelly (Universidad Nacional del Nordeste, Argentina). Estructura y calor de formación de biperóxidos cíclicos. Orientación de la docente para la realización de cálculos ab initio y de funcionales de la densidad

(01/1996 - 12/1996)

KIENINGER, Martina. Estudios sobre nucleasas químicas. Deutsche Krebsforschungszentrum, Alexander Von Humboldt Stiftung. (Tutor)

(01/1996 - 12/1996)

(01/1996 - 12/1996)

OTRA ACTIVIDAD TÉCNICO-CIENTÍFICA RELEVANTE

Referee Científico para el International Journal of Quantum Chemistry, EEUU (01/1999 - a la fecha)

Referee científico para el Journal of Physical Chemistry (01/1996 - a la fecha)

Referee científico para Theochem (01/1995 - a la fecha)

Referee Científico para Cell and Molecular Biology, EEUU (01/2004 - 12/2004)

Referee Científico para Anales de la Asociación Química Argentina (01/2000 - 12/2000)

Referee científico para el Advances in Quantum Chemistry (01/1997 - 12/1997)

GESTIÓN ACADÉMICA

Consejero Titular por el Orden Docente (04/1998 - a la fecha)

Consejo de la Facultad

Delegado área básica - CSIC, UDELAR (01/2000 - 12/2002)

Claustrista (01/1998 - 12/2002)

Claustro de la Facultad

Comisión Interfacultades de Ingeniería Química (01/1998 - 12/1999)

Comisión de Estructura Docente (01/1998 - 01/1999)

Comisión de Investigación Científica (01/1998 - 12/1998)

Claustrista (01/1994 - 01/1995)

Claustro de la Facultad

Integrante Comisión de Instituto (12/1990 - 05/1992)

Consejero Suplente (12/1990 - 05/1992)

Consejo de la Facultad

Comisión de Equipamiento Informático (01/1991 - 12/1991)

Comisión Técnica de Magister en Química y Doctorado (01/1989 - 12/1990)

Comisión de Redacción de Revista Científica (01/1989 - 01/1990)

Comisión Central de Facultad de Ciencias Exactas y Naturales (01/1988 - 01/1990)

Comisión de Reestructura de Facultad de Química (01/1988 - 12/1989)

Consejero Suplente (04/1985 - 04/1989)

Consejo de la Facultad

Cursos y Asuntos Curriculares (01/1986 - 01/1987)

Claustrista (01/1985 - 01/1987)

Claustro de la Facultad

Comisión de Investigación Científica (01/1985 - 01/1987)

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

VÍNCULOS CON LA INSTITUCIÓN

Colaborador (01/1987 - a la fecha)

Area Química, Investigador Grado 5.

ACTIVIDADES

PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN Y DESARROLLO

Caracterización fisicoquímica de plásticos polivinílicos y polímeros derivados de aldehídos de importancia química y bioquímica (01/1988 - 12/1991)

Dotación total US\$ 34.903. Integrantes: Oscar Néstor Ventura Pérez (Responsable)

Area Química

Investigación

Concluido

Alumnos encargados en el proyecto:

Pregrado:4

Maestría/Magister:1

Equipo:

GESTIÓN ACADÉMICA

Comisión de Ingreso de Investigadores (01/2006 - 12/2009)

Facultad de Química
Participación en consejos y comisiones

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

Facultad de Humanidades y Ciencias de la Educación - UDeLaR

VÍNCULOS CON LA INSTITUCIÓN

Funcionario/Empleado (01/1984 - 01/1986)

Profesor agregado ,40 horas semanales
Facultad de Humanidades y Ciencias. Química Cuántica

Funcionario/Empleado (01/1981 - 01/1985)

Asistente ,20 horas semanales
Facultad de Humanidades y Ciencias. Químico-Física

Funcionario/Empleado (01/1982 - 01/1984)

Profesor adjunto interino ,40 horas semanales
Facultad de Humanidades y Ciencias

Funcionario/Empleado (01/1981 - 01/1982)

Asistente ,40 horas semanales
Facultad de Humanidades y Ciencias. Química Cuántica

Funcionario/Empleado (01/1980 - 01/1981)

Ayudante ,20 horas semanales
Facultad de Humanidades y Ciencias. Química Cuántica

Funcionario/Empleado (01/1976 - 01/1979)

Ayudante Grado 1 ,20 horas semanales
Facultad de Humanidades y Ciencias. Ayudante de investigaciones

CARGA HORARIA

Carga horaria de docencia: 3 horas
Carga horaria de investigación: 30 horas
Carga horaria de formación RRHH: 10 horas
Carga horaria de extensión: 7 horas
Carga horaria de gestión: 10 horas

Producción científica/tecnológica

Especializado en la aplicación de métodos de la Química Computacional para la solución de problemas químicos y bioquímicos. Desde 1977, en que inicié mis actividades de investigación, empleé prácticamente todos los métodos desarrollados para cálculos de geometrías, energías, espectroscopía y caminos de reacción, en forma estática y dinámica. Las contribuciones más importantes que he realizado para resolver problemas en las áreas mencionadas son las siguientes: (a) determinación de caminos de reacción para transformaciones químicas donde el solvente participa activamente, tales como la isomerización de los ácidos hidroxámicos o las reacciones de enolización y aldólicas; (b) la producción de información termoquímica para compuestos pequeños pero de estructura electrónica complicada, como por ejemplo los óxidos de flúor, los radicales ROO. y moléculas de azufre tales como el sulfino, en muchos casos proveyendo correcciones a determinaciones experimentales no demasiado precisas; (c) la investigación de sustancias orgánicas halogenadas tanto como contaminantes como usadas en reemplazo de contaminantes, por ejemplo los hidrocarburos perfluorados, triflorometanol, bencenos y fenoles clorados, y policlorobenzofuranos; (d) estudio de reacciones enzimáticas y propuesta de nuevos mecanismos de acción, por ejemplo para la aldosa reductasa, apoyando y retroalimentando a los estudios experimentales; (e) estudios sobre complejos de metales de transición (Fe, Rh, Re, Tc) y sobre interacción entre moléculas orgánicas y nanopartículas (por ej. el coating de partículas de oro). En el

presente, mis investigaciones apuntan a cuatro grandes programas, que tienen puntos en común y dentro de los cuales se inscriben mis proyectos de investigación. El primero (ECOCOP) se centra en emplear las herramientas de la química teórica para resolver problemas en química atmosférica (contaminantes orgánicos persistentes) y en general problemas de contaminación (por ejemplo cloroorgánicos). El segundo programa (BIOCAB) apunta al estudio de mecanismos de reacción enzimáticos, especialmente metaloenzimas, como por ejemplo las oxigenasas y peroxidasas, pero también otras como la aldol reductasa o las fosfatasas humanas. Un tercer (QUICOMAD) se centra en el estudio de la química de la madera, particularmente procesos de pulpado como el Kraft y de blanqueo (con ClO₂, H₂O₂, peroxocarbónico, etc). Finalmente, el programa BASINMOL se centra en estudios básicos de problemas termoquímicos y su elaboración mesoscópica para realizar cálculos de ingeniería química molecular, en particular en combustión y química atmosférica. El producto de estos estudios es comunicado periódicamente a la comunidad científica. A Agosto 2015, he producido más de 115 artículos científicos y he hecho más de 150 comunicaciones a congresos, conferencias invitadas y minicursillos, en unos 30 países de las Américas, Europa y Africa. De acuerdo al análisis de citación de la Thomson Web of Science (WOS), cada uno de mis 101 artículos presentes en la base de datos ha sido empleado por otros autores (citado) un promedio de 12.89 veces, he tenido un promedio de 42 citas por año (con un total de 1.302 citas) y un h-index de 21. En Scopus, más completo que Thomson, hay presentes 108 artículos, 1.450 citas (promedio 13.43 citas por artículo) el h-index es 22 y el índice i10 es 47.

Producción bibliográfica

ARTÍCULOS PUBLICADOS

ARBITRADOS

Atmospheric reactivity of HC [triple bond, length as m-dash] CCH 2 OH (2-propyn-1-ol) toward OH radicals: experimental determination and theoretical comparison with its alkyne analogue (Completo, 2015)

GIBILISCO, RG, KIENINGER, MARTINA, VENTURA, O.N., TERUEL, MA
RSC Advances, v.: 5 129, p.:106668 - 106679, 2015

Palabras clave: Atmospheric chemistry Chemical kinetics Theoretical chemistry

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: London

ISSN: 20462069

DOI: [10.1039/C5RA19432F](https://doi.org/10.1039/C5RA19432F)

<http://pubs.rsc.org/en/content/articlelanding/2015/ra/c5ra19432f#!divAbstract>

The rate coefficient for the reaction of propargyl alcohol (2-propyn-1-ol, 2P1OL) with OH radicals has been determined using gas chromatography with a flame ionization detector (GC/FID) at 298 K and atmospheric pressure. The experimental value obtained by the relative method using methyl methacrylate and butyl acrylate as references was $(2.05 \pm 0.30) \times 10^{-11}$ cm³ per molecule per s. The present value was compared with previous determinations and a theoretical study of the reaction was performed in order to explain the differences in reactivity of the alcohol with that of the corresponding alkyne (propyne, P). A full discussion of the addition and abstraction mechanisms was developed for 2P1OL at the density functional and ab initio composite model levels. It was found that addition is much faster than abstraction for propyne but occurs at approximately the same rate for 2P1OL. In this last case, however, abstraction of hydrogen from the C1 carbon leads to a complex which can react further to yield addition products. Thermodynamic and kinetic data calculated for these reactions suggest that the products would be the 1,2- and 1,3-propanediol radicals. These products would react further with O₂, in the case where it is present in the reaction mixture.

Scopus® WEB OF SCIENCE®

Improved homology model of cyclohexanone monooxygenase from *Acinetobacter calcoaceticus* based on multiple templates (Completo, 2014)

E. BERMUDEZ, VENTURA, O.N., ERIKSSON, LA, SAENZ.MÉNDEZ, P
Computational Biology and Chemistry, v.: 49 p.:14 - 22, 2014

Palabras clave: enzimología computacional

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: 14769271

<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1476927114000140>

A new homology model of cyclohexanone monooxygenase (CHMO) from *Acinetobacter*

calcoaceticus is derived based on multiple templates, and in particular the crystal structure of CHMO from Rhodococcus sp. The derived model was fully evaluated, showing that the quality of the new structure was improved over previous models. Critically, the nicotinamide cofactor is included in the model for the first time. Analysis of several molecular dynamics snapshots of intermediates in the enzymatic mechanism led to a description of key residues for cofactor binding and intermediate stabilization during the reaction, in particular Arg327 and the well known conserved motif (FxGxxxHxxxW) in BaeyerVilliger monooxygenases, in excellent agreement with known experimental and computational data.

Scopus' WEB OF SCIENCE™

Theoretical insight into the mechanism for the inhibition of the cysteine protease cathepsin B by 1, 2, 4-thiadiazole derivatives (Completo, 2014)

VEGA-TEIJIDO, MA, MALUF, SEC, BONTURI, CR, VENTURA, O.N., AMABRANO, JR
Journal of Molecular Modeling, v.: 20 6, p.:1 - 14, 2014

Palabras clave: Proteínas, DFT, mecanismo de reacción

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: 09485023

DOI: [10.1007/s00894-014-2254-0](https://doi.org/10.1007/s00894-014-2254-0)

<http://link.springer.com/article/10.1007/s00894-014-2254-0>

Several cellular disorders have been related to the overexpression of the cysteine protease cathepsin B (CatB), such as rheumatic arthritis, muscular dystrophy, osteoporosis, Alzheimer's disease, and tumor metastasis. Therefore, inhibiting CatB may be a way to control unregulated cellular functions and prevent tissue malformations. The inhibitory action of 1,2,4-thiadiazole (TDZ) derivatives has been associated in the literature with their ability to form disulfide bridges with the catalytic cysteine of CatB. In this work, we present molecular modeling and docking studies of a series of eight 1,2,4-thiadiazole compounds. Substitutions at two positions (3 and 5) on the 1,2,4-thiadiazole ring were analyzed, and the docking scores were correlated to experimental data. A correlation was found with the sequence of scores of four related compounds with different substituents at position 5. No correlation was observed for changes at position 3. In addition, quantum chemistry calculations were performed on smaller molecular models to study the mechanism of inhibition of TDZ at the active site of CatB. All possible protonation states of the ligand and the active site residues were assessed. The tautomeric form in which the proton is located on N2 was identified as the species that has the structural and energetic characteristics that would allow the ring opening of 1,2,4-thiadiazole.

Density functional and chemical model study of the competition between methyl and hydrogen scission of propane and β -scission of the propyl radical (Completo, 2013)

SEGOVIA; ME, IRVING, K, VENTURA, O.N.

Theoretical Chemistry Accounts (E), v.: 132 1, p.:1 - 18, 2013

Palabras clave: kinetics

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: 14322234

In this work, we study the competence between the reactions of hydrogen and methyl scission during thermal cracking and combustion of propane, the emergence of the two isomers of the propyl radical, n-propyl and i-propyl, and their subsequent β -scission reaction to ethene and methyl radical. The purpose of the study was to analyze the accuracy of density functional (DFT) methods as applied on this relatively well-known subset of the reactions implied in the production of propylene oxide from propane and propene. ...

Scopus'

EXPERIMENTAL AND THEORETICAL STUDY OF THE MOVEMENT OF THE WPD FLEXIBLE LOOP OF HUMAN PROTEIN TYROSINE PHOSPHATASE PTP1B IN COMPLEX WITH HALIDE IONS (Completo, 2012)

KATZ, A, SAENZ.MÉNDEZ, P, COUSIDO-SIAH, A, PODJARNY, AD, VENTURA, O.N.

Biophysical Reviews and Letters, v.: 3 3, p.:197 - 217, 2012

Palabras clave: enzimología computacional

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: 17930480

Protein tyrosine phosphorylation is a post-translational modification mechanism, crucial for the regulation of nearly all aspects of cell life. This dynamic, reversible process is regulated by the balanced opposing activity of protein tyrosine kinases and protein tyrosine phosphatases. In particular, the protein tyrosine phosphatase 1B (PTP1B) is implicated in the regulation of the insulin-receptor activity, leptin-stimulated signal transduction pathways and other clinically relevant metabolic routes, and it has been found overexpressed or ...

Scopus'

Computational study on the partial dechlorination of the pesticide chloropicrin by sulfur species (Completo, 2011)

VENTURA, O.N., SAENZ-MENDEZ, P., BOTTINELLI, F.

Theoretical Chemistry accounts (Print), v.: 130 3, 2011

Palabras clave: Chloropicrin

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química / Química computacional

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 1432881X

DOI: [10.1007/s00214-011-1057-y](https://doi.org/10.1007/s00214-011-1057-y)

<http://www.springerlink.com/content/77127807p7463027/>

Density functional and MP2 calculations with extended basis sets were performed on the species participating in both the previously suggested and a newly proposed mechanisms of partial dechlorination of chloropicrin by simple sulfur species, both in gas phase and in a simulated water environment. Thermochemistry of both mechanisms in the gas phase was also studied using the chemical models G3 and G4. It is shown that the previously proposed reductive dehalogenation is not thermodynamically feasible at room temperature, as it should be according to the experimental evidence. Although inclusion of the solvent improves the results with respect to gas phase, the thermodynamics of the proposed mechanism by Zheng et al. is still unfavorable for obtaining the experimental products. An alternative mechanism is then proposed, involving the formation of HSCl, which is the intermediate that then undergoes redox reactions. Such a mechanism is exothermic and spontaneous, according to the computational results, and produces elementary sulfur in agreement with the experimental facts.

Scopus' WEB OF SCIENCE™

Mechanism of Organocatalyzed Decarboxylative Knoevenagel-Doebner Reaction. A Theoretical Study (Completo, 2010)

E. BERMUDEZ, VENTURA, O.N., SAENZ-MENDEZ, P.

The Journal of Physical Chemistry, v.: 114 50, p.:13086 - 13092, 2010

Palabras clave: Knoevenagel-Doebner Reaction

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química / Química computacional

Medio de divulgación: Papel

Lugar de publicación: USA

ISSN: 15205207

DOI: [10.1021/jp109703f](https://doi.org/10.1021/jp109703f)

<http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/jp109703f>

We have investigated important intermediates and key transition states of the organocatalyzed Knoevenagel condensation using density functional theory and two different basis sets (6-31 G(d,p) and 6-311++G(2df,2pd)), both in gas phase and simulating the bulk solvent (pyridine) using the PCM method. Calculated structures for reactants, intermediates, and key transition states suggest that the secondary amine catalyst is essential, both for activating the aldehyde for nucleophilic attack, and in the possible decarboxylation pathways. The calculated results are shown to agree with available experimental information. On the basis of the results obtained, the studied mechanism may be important in the understanding of vinylphenol production during malting and brewing of wheat and barley grains.

Electronic and structural distortions in graphene induced by carbon vacancies and boron doping (Completo, 2010)

FACCIO, R., WERNER, L. F., PARDO, H., GOYENOLA, C., VENTURA, O.N., MOMBRU, A. W.

The Journal of Physical Chemistry, v.: A 114 44, p.:18961 - 18971, 2010

Palabras clave: Boron Doping Graphene

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química / Química computacional

Medio de divulgación: Papel

Lugar de publicación: USA

ISSN: 15205207

DOI: [10.1021/jp106764h](https://doi.org/10.1021/jp106764h)

<http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/jp106764h>

We present an ab initio DFT/GGA study on the structural and electronic distortions of modified graphene by the creation of vacancies, the inclusion of boron atoms, and the coexistence of both, by means of total energy and band structure calculations. In the case of coexistence of boron atoms and vacancy, the modified graphene presents spin polarization only when B atoms locate far from vacancy. Thus, when a boron atom fills single and divacancies, it suppresses the spin polarization of the charge density. In particular, when B atoms fill a divacancy, a new type of rearrangement occurs, where a stable BC₄ unit is formed inducing important out-of-plane distortions to graphene. All these findings suggest that new chemical modifications to graphene and new types of vacancies can be used to modify its electronic properties.

Regioselective epoxide ring-opening using boron trifluoride diethyl etherate: DFT study of an alternative mechanism to explain the formation of syn-fluorohydrins (Completo, 2009)

SAENZ-MENDEZ, P., CACHAU, R.E., SEOANE, G., VENTURA, O.N.

Journal of Molecular Structure Theochem, v.: 904 1-3, p.:21 - 27, 2009

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química / Química computacional

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 01661280

Scopus® WEB OF SCIENCE™

Quantum model of catalysis based on a mobile proton revealed by subatomic x-ray and neutron diffraction studies of h-aldose reductase. (Completo, 2008)

BLAKELEY, M. P., RUIZ, F., CACHAU, R.E., HAZEMANN, I., MEILLEUR, F., MITSCHLER, A., GINELL, S., AFONINE, P., VENTURA, O.N., COUSIDO-SIAH, A., HAERTLEIN, M., JOACHIMIAK, A., MYLES, D., PODJARNY, A. D.

Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America, v.: 105 p.:1844 - 1848, 2008

Palabras clave: proteins, molecular dynamics

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química / Física Molecular

Medio de divulgación: Papel

Lugar de publicación: USA

ISSN: 00278424

Scopus® WEB OF SCIENCE™

The water dimer: ab initio and density functional calculations on the potential energy surface (Completo, 1998)

VENTURA, O.N., KIENINGER, MARTINA, SUHAI, S., DIERCKSEN, G.H.F.

Molecular Engineering, v.: 7 p.:317 - 325, 1998

Palabras clave: Química computacional

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: 09255125

Importance of water in the aldol condensation reactions of acetaldehyde (Completo, 1994)

COITIÑO, E.L., TOMASI, J., VENTURA, O.N.

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

Palabras clave: Química computacional

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: 03009238

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

COITIÑO, E.L. , VENTURA, O.N.

Folia Chimica Theoretica Latina, v.: 17 p.:191 - 223, 1989

Palabras clave: Química computacional

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: 03784843

Estudios sobre la teoría electrónica del cáncer.II.La interacción de la N-Metilglioxalimida con un dipéptido (Completo, 1981)

VENTURA, O.N. , SOSA, R.M.

Acta Sudamericana de Química, v.: 1 p.:57 - 67, 1981

Palabras clave: Química computacional

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Otros

ISSN: 07160402

Interacción del metilglioxal con la formamida (Completo, 1980)

VENTURA, O.N. , SOSA, R.M. , LIBERLES, A. , SALGADO, G.

Revista de la Real Acad de Ciencias Exactas Fisicas y Naturales de Madrid, v.: 74 p.:547 - 565, 1980

Palabras clave: Química computacional

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular / Química Teórica y Computacional

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 00340596

Estudio de la influencia de la deslocalización en la conformación de derivados del glioxal (Completo, 1979)

VENTURA, O.N.

Anales de La Facultad de Química de Montevideo, v.: 9 p.:59 - 70, 1979

Palabras clave: Química computacional Análisis Conformacional

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: 07971400

Sobre la estadística en Mecánica Cuántica. La definición de valor medio (Completo, 1978)

VENTURA, O.N.

Anales de La Facultad de Química de Montevideo, v.: 8 p.:129 - 145, 1978

Palabras clave: estadística

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 07971400

NO ARBITRADOS

Calculations of the infrared and Raman spectra of simple thiols and thiolwater complexes (Completo, 2011)

KIENINGER, MARTINA, VENTURA, O.N.

International Journal of Quantum Chemistry, v.: 111 7-8 , p.:1843 - 1857, 2011

Palabras clave: Raman Spectroscopy

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química / Química

computacional

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 00207608

DOI: [10.1002/qua.22890](https://doi.org/10.1002/qua.22890)

<http://onlinelibrary.wiley.com.proxy.timbo.org.uy:443/doi/10.1002/qua.22890/abstract;jsessionid=4B10>

The frequencies and intensities of infrared and Raman spectra of H₂S, CH₃SH, CH₃CH₂SH, and CH₂[DOUBLE BOND]CHCH₂SH, isolated and complexed with one water molecule acting as a proton acceptor were calculated at the ab initio and density functional level. Hartree-Fock, MP2 and CCSD(T) methods were used both for the geometry optimization and spectra calculations at the molecular orbital level. The B3LYP, PBE0, and M06 exchange-correlation potentials were employed to calculate the same properties at the DFT level. Both Pople basis sets, 6-31+G(d) and 6-311++G(3df,2pd), and Dunning basis sets, aug-cc-pVTZ and aug-cc-pVQZ, were used. SH and CS frequency shifts upon water complexation were studied, and a discussion is performed on the expected relation between the CH and CS Raman activities, in view of their usefulness for studies in protein chemistry. Scaling factors for the vibrational frequencies were obtained for all the combination of methods and basis sets, and shown to be completely similar to the ones present in the literature when available. Scaling factors for the M06 method are presented for the first time with these basis sets. © 2010 Wiley Periodicals, Inc. Int J Quantum Chem, 2010

On the structure, infrared and Raman spectra of the 2:1 cysteine-Zn complex (Completo, 2010)

KIENINGER, MARTINA, VENTURA, O.N.

Theoretical Chemistry accounts (Print), v.: 125 3-6 , p.:279 - 291, 2010

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química / Química computacional

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 1432881X

On the experimental structure of monoperoxocarbonic acid and the enthalpy of formation of carbonic acid, peroxyformic acid and monoperoxocarbonic acid in gas phase (Completo, 2009)

KIENINGER, MARTINA, SAENZ-MENDEZ, P, VENTURA, O.N.

Chemical Physics Letters, v.: 480 1-3 , p.:52 - 56, 2009

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química / Química computacional

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 00092614

Theoretical study of the structure of neutral, radical and anionic monoperoxo carbonic acid (Completo, 2009)

SAENZ-MENDEZ, P, ERIKSSON, L. F., VENTURA, O.N.

Journal of Molecular Structure Theochem, v.: 913 1-3 , p.:131 - 138, 2009

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química / Química computacional

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 01661280

Interaction of simple ions with water: Theoretical models for the study of ion hydration (Completo, 2009)

GANCHEFF, J. , KREMER, C. , VENTURA, O.N.

Journal of Chemical Education, v.: 86 12 , p.:1403 - 1407, 2009

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química / Química computacional

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 00219584

Conformational analysis of trans-[ReO₂(pn)₂]⁺ in aqueous solution by NMR and DFT calculations (Completo, 2008)

GANCHEFF, J. , KREMER, C. , SEOANE, G , VENTURA, O.N., DOMINGUEZ, S.

Journal of Molecular Structure, v.: 892 1-3 , p.:21 - 27, 2008

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química / Química computacional

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 00222860

<http://dx.doi.org/10.1016/j.molstruc.2008.05.008>

Fast pattern recognition of protein three dimensional features using a bit-pattern approach as a prescreen (Resumen, 2007)

YEN P., VENTURA, O.N., BURT, S., CACHAU, R.E.

Biophysical Journal, v.: 2007 Supl. S, p.:567 - 567, 2007

Medio de divulgación: Papel

Lugar de publicación: USA

ISSN: 00063495

Structural characterization of peptides from phage-display libraries (Resumen, 2007)

CACHAU, R.E., KRUMPE, L. R. H., MORI, T., VENTURA, O.N., BURT, S.

Biophysical Journal, v.: 2007 Supl. S, p.:388 - 388, 2007

Medio de divulgación: Papel

Lugar de publicación: USA

ISSN: 00063495

Aldose reductase studied by comparative analysis of neutron scattering, X-ray ultra-high resolution and QM electron density maps and molecular dynamics (Resumen, 2007)

CACHAU, R.E., PODJARNY, A. D., RUIZ, F., VENTURA, O.N.

Biophysical Journal, v.: 2007 Supl. S, p.:213 - 213, 2007

Medio de divulgación: Papel

Lugar de publicación: USA

ISSN: 00063495

Comparison of large basis set DFT and MP2 calculations in the study of the barrier for internal rotation of 2,3,5,6-tetrafluoroanisole (Completo, 2007)

KIENINGER, MARTINA, CACHAU, R.E., OBERHAMMER, H., VENTURA, O.N.

International Journal of Quantum Chemistry, v.: 107 p.:403 - 417, 2007

Medio de divulgación: Papel

Lugar de publicación: USA

ISSN: 00207608

Adsorption of 2-thioisobarbituric acid on gold nanoparticles. Identification of tautomeric forms (Completo, 2007)

MENDEZ, E., CERDA, M. F., GANCHEFF, J., TORRES, J., KREMER, C., CASTIGLIONI, J., KIENINGER, MARTINA, VENTURA, O.N.

Journal of Physical Chemistry C, v.: 111 p.:3369 - 3383, 2007

Medio de divulgación: Papel

Lugar de publicación: USA

ISSN: 19327447

In-silico nanobio-design. A new frontier in computational biology (Completo, 2007)

CACHAU, R.E., GONZALEZ-NILO, D., VENTURA, O.N., FRITTS, M. J.

Current Topics in Medicinal Chemistry, v.: 7 p.:1537 - 1540, 2007

Medio de divulgación: Papel

Lugar de publicación: USA

ISSN: 15680266

Use of bibliometric information to assist research policy making. A comparison of publication and citation profiles of Full and Associate Professors at a School of Chemistry in Uruguay (Completo, 2006)

VENTURA, O.N., MOMBRÚ, A.W.

Scientometrics, v.: 69 p.:287 - 313, 2006

Medio de divulgación: Papel

Lugar de publicación: Netherlands

ISSN: 01389130

[http://www.springerlink.com/content/e6288423j7n8ut63/?](http://www.springerlink.com/content/e6288423j7n8ut63/?p=8d99a96677474093a3ef4573571f713b&pi=0)

[p=8d99a96677474093a3ef4573571f713b&pi=0](http://www.springerlink.com/content/e6288423j7n8ut63/?p=8d99a96677474093a3ef4573571f713b&pi=0)

Publication and citation profiles of Full and Associate Professors at the School of Chemistry of the Universidad de la República in Uruguay were investigated. The groups do not exhibit markedly different age averages. However, the average time since they started publishing, as well as other characteristics of their publication records, like productivity or citations, set them apart. From the point of view of both the number of papers per author and per year of activity, on one side, and of the number of citations per year of activity, on the other, the group of Full Professors has statistically significant larger averages than the Associate Professors. The impact of self-citations, multi-authorship and internationalization of the publications were analyzed within the two groups and shown to have no excessive or predictable influence on those parameters, except in the case of few (≤ 2) or many (>8) authors. It is suggested in this paper that these two indicators, number of papers per author per production year and number of citations per production year, combined in a plot allowing a bidimensional ranking of the individuals in the groups, may be used profitably as one of the components in the development of a policy toward promotion of Associate Professors. The analysis showed also that the quotient of citations received to number of papers published, even when derived from actual citation data of the scientists without involving the impact factors of the journals in which they publish, are not good parameters to use for that purpose, essentially because there is a reduction in the information content of the indicator with respect to those described before.

A new perspective in the Lewis acid catalyzed ring opening of epoxides. Theoretical study of some complexes of methanol, acetic acid, dimethylether, diethylether and ethylene oxide with boron trifluoride (Completo, 2006)

VENTURA, O.N., SAENZ-MENDEZ, P., CACHAU, R.E., SEOANE, G., KIENINGER, MARTINA

Journal of Physical Chemistry A, v.: 110 p.:11734 - 11751, 2006

Medio de divulgación: Papel

Lugar de publicación: USA

ISSN: 10895639

ReO₂⁺ chelates with aliphatic diamines. Structural and proton transfer properties (Completo, 2006)

GANCHEFF, J., KREMER, C., VENTURA, O.N., DOMINGUEZ, S., BAZZICALUPI, C., BIANCHI, A., SUESCUN, L., MOMBRÚ, A.W.

New Journal of Chemistry, v.: 30 p.:1650 - 1654, 2006

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 11440546

Density functional computational thermochemistry. Accurate determination of the enthalpy of formation of perfluoropropane from DFT and ab initio calculations on isodesmic reactions (Completo, 2005)

VENTURA, O.N., SEGOVIA, M.E.

Chemical Physics Letters, v.: 403 4-6, p.:378 - 384, 2005

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 00092614

Molecular structure and internal rotation of 2,3,5,6-tetrafluoroanisole as studied by gas-phase electron diffraction and quantum chemical calculations (Completo, 2005)

BELYAKOV, A.V., VENTURA, O.N., KIENINGER, MARTINA, CACHAU, R.E., OBERHAMMER, H.

Journal of Physical Chemistry A, v.: 109 2, p.:394 - 399, 2005

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 10895639

A comparative density functional study of the torsional potential of 4-fluoro (trifluoromethoxy)benzene and related species (Completo, 2004)

KIENINGER, MARTINA, VENTURA, O.N., DIERCKSEN, G.H.F.

Chemical Physics Letters, v.: 389 4-6, p.:405 - 412, 2004

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 00092614

Ab Initio and Density Functional Study of Thionitroso XNS and Thiazyl Isomers XSN, X = H, F, Cl, Br, OH, SH, NH₂, CH₃, CF₃, and SiF₃ (Completo, 2004)

DENIS, P. , VENTURA, O.N. , MAI, H.T. , NGUYEN, M.T.

Journal of Physical Chemistry A, v.: 108 23 , p.:5073 - 5080, 2004
Medio de divulgación: Otros
ISSN: 10895639

CCSDT study of the fluoroperoxy radical, FOO (Completo, 2004)

DENIS, P. , VENTURA, O.N.

Chemical Physics Letters, v.: 385 3-4 , p.:292 - 297, 2004
Medio de divulgación: Papel
ISSN: 00092614

CCSDT study of the fluoroperoxy radical, FOO (Errata, vol 385, pg 292, 2004) (Completo, 2004)

DENIS, P. , VENTURA, O.N.

Chemical Physics Letters, v.: 395 4-6 , p.:385 - 386, 2004
Medio de divulgación: Papel
ISSN: 00092614

Dichloro(cyclohexilidene-1-methylene)(phenyl)Te(IV). Looking for the theoretical treatment (Completo, 2004)

VEGA-TEJIDO, M. , ZUCKERMAN-SCHPECTOR, J. , VENTURA, O.N. , CARILLO, R.L. ,
CARACELLI, I. , GUADAGNIN, R.C. , BRAGA, A.L. , SILVEIRA, C.C.

Zeitschrift für Kristallographie, v.: 219 10 , p.:652 - 658, 2004
Medio de divulgación: Papel
ISSN: 00442968

A new addition to the structural bioinformatics toolbox: 3D models of short bioactive peptides from multiple sequences using feedback restrained molecular dynamics (FRMD) (Completo, 2003)

CACHAU, R.E. , GONZÁLEZ-SAPIENZA, G. , BURT, S. , VENTURA, O.N.

Cellular and Molecular Biology, v.: 49 6 , p.:973 - 983, 2003
Medio de divulgación: Papel
ISSN: 01455680

Complete basis set and density functional determination of the enthalpy of formation of the controversial HO₃ radical. A discrepancy between theory and experiment (erratum, vol 365, pg 440, 2002) (Completo, 2003)

DENIS, P.A. , KIENINGER, MARTINA , VENTURA, O.N. , CACHAU, R.E. , DIERCKSEN, G.H.F.

Chemical Physics Letters, v.: 377 3-4 , p.:483 - 484, 2003
Medio de divulgación: Papel
ISSN: 00092614

Density functional computational thermochemistry: Determination of the enthalpy of formation of methanethial-S,S-dioxide (sulfene) (Completo, 2003)

VENTURA, O.N. , KIENINGER, MARTINA , DENIS, P.A.

Journal of Physical Chemistry A, v.: 107 4 , p.:518 - 521, 2003
Medio de divulgación: Otros
ISSN: 10895639

Density functional study of the decomposition pathways of nitroethane and 2-nitropropane (Completo, 2003)

DENIS, P.A. , VENTURA, O.N. , LE, H.T. , NGUYEN, M.T.

Physical Chemistry Chemical Physics, v.: 5 9 , p.:1730 - 1738, 2003
Medio de divulgación: Papel
ISSN: 14639076

DYNGA: a general purpose QM-MM-MD program. I. Application to water (Completo, 2003)

PARKER, C.L. , VENTURA, O.N. , BURT, S. , CACHAU, R.E.

Molecular Physics, v.: 101 17 , p.:2659 - 2668, 2003

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 00268976

The QUITEL-2002. Preface (Completo, 2003)

VENTURA, O.N. , NASCIMENTO, M.A.C. , ECHAVE, J.

Theoretical Chemistry accounts (Print), v.: 110, 6 , p.:359 - 359, 2003

Medio de divulgación: Otros

ISSN: 1432881X

Complete basis set and density functional determination of the enthalpy of formation of the controversial HO3 radical: a discrepancy between theory and experiment (Completo, 2002)

DENIS, P.A. , KIENINGER, MARTINA , VENTURA, O.N. , CACHAU, R.E. , DIERCKSEN, G.H.F.

Chemical Physics Letters, v.: 365 5-6, , p.:440 - 449, 2002

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 00092614

Computational determination of the enthalpy of formation of alkylthial S-oxides and alkylthione S-oxides: a study of (Z)-propanethial-S-oxide, the lachrymatory factor of the onion (Allium cepa) (Completo, 2002)

VENTURA, O.N. , KIENINGER, MARTINA

Physical Chemistry Chemical Physics, v.: 4 18, , p.:4328 - 4333, 2002

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 14639076

Density functional computational thermochemistry: solving the discrepancy between MO and DFT calculations on the enthalpy of formation of sulfine, CH₂=S=O (Completo, 2002)

VENTURA, O.N. , KIENINGER, MARTINA , DENIS, P.A. , CACHAU, R.E.

Chemical Physics Letters, v.: 355 3-4 , p.:207 - 213, 2002

Medio de divulgación: Otros

ISSN: 00092614

Density functional study of technetium and rhenium compounds (Completo, 2002)

GANCHEFF, J. , KREMER, C. , KREMER, E. , VENTURA, O.N.

Journal of Molecular Structure Theochem, v.: 580 p.:107 - 116, 2002

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 01661280

Low-temperature magnetic properties of LuBaCuFeO₅+delta and TmBaCuFeO₅+delta (Completo, 2002)

MOMBRÚ, A.W. , GOETA, A.W. , PARDO, H. , LISBOA, P.N. , SUESCUN, L. , MARIEZCURRENA, R.A. , VENTURA, O.N. , BEHAK, R. , ANDERSEN, K.H. , ARAÚJO-MOREIRA, F.M.

Journal of Solid State Chemistry, v.: 166 1 , p.:251 - 258, 2002

Medio de divulgación: Otros

ISSN: 00224596

Density functional computational thermochemistry: Isomerization of sulfine and its enthalpy of formation (Completo, 2001)

VENTURA, O.N. , KIENINGER, MARTINA , DENIS, P.A. , CACHAU, R.E.

Journal of Physical Chemistry A, v.: 105 43 , p.:9912 - 9916, 2001

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 10895639

Density functional investigation of atmospheric sulfur chemistry II. The heat of formation of the XSO₂ radicals X = H, CH₃ (Completo, 2001)

VENTURA, O.N., DENIS, P.A.

Chemical Physics Letters, v.: 344 1-2, p.:221 - 228, 2001

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 00092614

Hydroxamic chelates of boric acids, a density functional study (Completo, 2001)

DENIS, P.A., VENTURA, O.N.

Journal of Molecular Structure Theochem, v.: 537 p.:173 - 180, 2001

Medio de divulgación: Otros

ISSN: 01661280

Synthesis, characterization and solution chemistry of new Re(V) dioxo complexes (Completo, 2001)

GANCHEFF, J., MELIAN, C., KREMER, C., DOMINGUEZ, S., MEDEROS, A., VENTURA, O.N., KREMER, E.

Journal of Coordination Chemistry, v.: 54 3-4, p.:285 - 296, 2001

Medio de divulgación: Otros

ISSN: 00958972

Synthesis, structure and magnetic properties of Mn(II) and Cu(II) complexes with the dicyano-acetic acid methyl ester anion (Completo, 2001)

KREMER, C., MELIAN, C., TORRES, J., JUANICÓ, M.P., LAMAS, C., PEZAROGLO, H., MANTA, E., SCHUMANN, H., PICKARDT, J., GIRGSDIES, F., VENTURA, O.N., LLORET, F.

Inorganica Chimica Acta, v.: 314 1-2, p.:83 - 90, 2001

Medio de divulgación: Otros

ISSN: 00201693

Density Functional Computational Thermochemistry. Determination of the Enthalpy of Formation of Sulfine, CH₂=S=O, at Room Temperature (Completo, 2000)

VENTURA, O.N., KIENINGER, MARTINA, CACHAU, R.E., SUHAI, S.

Chemical Physics Letters, v.: 329 1-2, p.:145 - 153, 2000

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 00092614

Density functional investigation of atmospheric sulfur chemistry. I. Enthalpy of formation of HSO and related molecules (Completo, 2000)

DENIS, P.A., VENTURA, O.N.

International Journal of Quantum Chemistry, v.: 80 3, p.:439 - 453, 2000

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 00207608

A theoretical study of excited state proton transfer in 3-hydroxychromone and related molecules (Completo, 1999)

ESTIÚ, G., RAMA, J.B., PEREIRA, A., CACHAU, R.E., VENTURA, O.N.

Journal of Molecular Structure Theochem, v.: 487 3, p.:221 - 230, 1999

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 01661280

Density Functional and Coupled-Cluster Calculations of Isodesmic Reactions Involving Fluorine Oxides (Completo, 1999)

VENTURA, O.N., CACHAU, R.E., KIENINGER, MARTINA

Chemical Physics Letters, v.: 301 3-4, p.:331 - 335, 1999

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 00092614

Density Functional Theory is more Accurate than Coupled-Cluster Theory in the Study of the Thermochemistry

of Species Containing the FO Bond (Completo, 1999)

VENTURA, O.N., KIENINGER, MARTINA, CACHAU, R.E.

Journal of Physical Chemistry A, v.: 103 1, p.:147 - 151, 1999

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 10895639

Synthesis, Characterization and Crystal Structure of [ReO(Me4tu)4](PF6)3 (Completo, 1999)

GAMBINO, D., KREMER, E., BARAN, E.J., MOMBRÚ, A.W., SUESCUN, L., MARIEZCURENA, R., KIENINGER, MARTINA, VENTURA, O.N.

Zeitschrift für Anorganische und Allgemeine Chemie, v.: 625 5, p.:813 - 819, 1999

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 00442313

Glycine conformations: gradient corrected DFT studies (Completo, 1998)

KIENINGER, MARTINA, VENTURA, O.N., SUHAI, S.

Journal of Molecular Structure Theochem, v.: 433 201, p.:193 1998

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 01661280

A discrepancy between experimental and theoretical thermochemical characterization of some oxygen fluorides (Completo, 1998)

KIENINGER, MARTINA, SEGOVIA, M.E., VENTURA, O.N.

Chemical Physics Letters, v.: 287 5-6, p.:597 - 600, 1998

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 00092614

AccuModel v1.1 for Windows95 (Completo, 1998)

VENTURA, O.N.

Journal of Chemical Information and Computer Sciences, v.: 38 4, p.:768 - 770, 1998

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 00952338

Computational Chemistry as an Analytical Tool: Thermochemical Examples in Atmospheric Chemistry (Completo, 1998)

VENTURA, O.N., KIENINGER, MARTINA

Pure and Applied Chemistry, v.: 70 12, p.:2301 - 2307, 1998

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 00334545

Density Functional Investigations of Carboxyl Free Radicals: Formyloxyl, Acetyloxyl and Benzoyloxyl Radicals (Completo, 1998)

KIENINGER, MARTINA, VENTURA, O.N., SUHAI, S.

International Journal of Quantum Chemistry, v.: 70 2, p.:253 - 267, 1998

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 00207608

An analysis of static dipole polarizabilities using density functional theory: N2, H2, F- and HF (Completo, 1997)

VENTURA, O.N., KIENINGER, MARTINA, CERNUSAK, I.

Journal of Molecular Structure, v.: 437 p.:489 - 501, 1997

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 00222860

Density functional and ab initio study of the free radical MgNC (Completo, 1997)

KIENINGER, MARTINA, IRVING, K., RIVAS-SILVA, F., PALMA, A., VENTURA, O.N.

Journal of Molecular Structure Theochem, v.: 422 p.:133 - 141, 1997

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 01661280

Density Functional and G2 Study of the strength of the OH Bond in CF₃OH (Completo, 1997)

SEGOVIA, M.E., VENTURA, O.N.

Chemical Physics Letters, v.: 277 5-6, p.:490 - 496, 1997

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 00092614

Density Functional Theory: A Useful Tool for the Study of Free Radicals (Completo, 1997)

VENTURA, O.N., KIENINGER, MARTINA, IRVING, K.

Advances in Quantum Chemistry, v.: 28 p.:293 - 309, 1997

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 00653276

Density of levels in vibrational spectra of molecules (Completo, 1997)

KARWOWSKI, J., VENTURA, O.N., BANCEWICZ, M.

International Journal of Quantum Chemistry, v.: 63 4, p.:835 - 842, 1997

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 00207608

Equilibrium structure of the carbon dioxide water complex in the gas phase: An ab initio and density functional study (Completo, 1997)

VENTURA, O.N., KIENINGER, MARTINA

Journal of Molecular Structure Theochem, v.: 390 p.:157 - 167, 1997

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 01661280

Structural and conformational analysis of Tc(V) and Re(V) dioxocomplexes. X-ray structure of [TcO₂(tn)₂].H₂O (Completo, 1997)

KREMER, C., GANCHEFF, J., KREMER, E., MOMBRÚ, A.W., GONZÁLEZ, O., MARIEZCURRENA, R., SUESCUN, L., CUBAS, M.L., VENTURA, O.N.

Polyhedron, v.: 16 19, p.:3311 - 3316, 1997

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 02775387

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

VENTURA, O.N., KIENINGER, MARTINA, COITIÑO, E.L.

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

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 01928651

Transition states for H-radical reactions: LiFH as a stringent test case for density functional methods (Completo, 1996)

VENTURA, O.N.

Molecular Physics, v.: 89 6, p.:1851 - 1870, 1996

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 00268976

Ab initio MP2, MCSCF and MR-SDCI study on the structure of O₄ and comparison with the hypervalent CO₃ and SO₃ species (Completo, 1995)

FERREIRA, E., GARDIOL, P., SOSA, R.M., VENTURA, O.N.

Journal of Molecular Structure Theochem, v.: 335 p.:63 - 68, 1995
Medio de divulgación: Papel
ISSN: 01661280

Gas-phase structure and acidity of formohydroxamic acid and formamide: a comparative ab initio study (Completo, 1995)

VENTURA, O.N., RAMA, J.B., TURI, L., DANNENBER, J.J.

Journal of Physical Chemistry, v.: 99 1, p.:131 - 136, 1995
Medio de divulgación: Papel
ISSN: 00223654

High level ab initio prediction of the structure and infrared spectra of formaldehyde-water radical-cation complexes (Completo, 1995)

COITIÑO, E.L., PEREIRA, A., VENTURA, O.N.

Journal of Chemical Physics, v.: 102 7, p.:2833 - 2840, 1995
Medio de divulgación: Papel
ISSN: 00219606

On the structure of the 3B1 excited state of water (Completo, 1995)

VENTURA, O.N., LATAJKA, Z., RATAJACK, H., ORVILLE-THOMAS, W.J.

Journal of Molecular Structure Theochem, v.: 334 2-3, p.:127 - 136, 1995
Medio de divulgación: Papel
ISSN: 01661280

The FO2 radical: a new success of density functional theory (Completo, 1995)

VENTURA, O.N., KIENINGER, MARTINA

Chemical Physics Letters, v.: 245 4-5, p.:488 - 497, 1995
Medio de divulgación: Papel
ISSN: 00092614

Ab initio study of the structure of radical cations derived from H-bonded complexes: a comparison between [H₂CO.H₂O]⁺ and [H₂CO.HF]⁺ (Completo, 1994)

PEREIRA, A., COITIÑO, E.L., VENTURA, O.N.

Journal of Molecular Structure Theochem, v.: 120 1-2, p.:31 - 38, 1994
Medio de divulgación: Papel
ISSN: 01661280

An AM1 semiempirical study of the mechanism of sintering for ZnO in the presence of water and carbon monoxide (Completo, 1994)

VILA, F., VENTURA, O.N., VARELA, J.A., LONGO, E.

Journal of Molecular Structure Theochem, v.: 111 p.:175 - 184, 1994
Medio de divulgación: Papel
ISSN: 01661280

The dimerization shift of the OH-stretching fundamentals of the water dimer (Completo, 1994)

VENTURA, O.N., IRVING, K., LATAJKA, Z.

Chemical Physics Letters, v.: 217 4, p.:436 - 442, 1994
Medio de divulgación: Papel
ISSN: 00092614

Ab-initio study of structure and reactivity of H₂CO.H₂O-center-DOT⁺ and related radical cations (Completo, 1993)

COITIÑO, E.L., LLEDOS, A., SERRA, R., BERTAN, J., VENTURA, O.N.

Journal of the American Chemical Society, v.: 115 20 , p.:9121 - 9126, 1993
Medio de divulgación: Papel
ISSN: 00027863

Acidity of hydroxamic acids: an ab initio and semiempirical study (Completo, 1993)

RAMA, J. , TURI, L. , DANNENBERG, J.J. , VENTURA, O.N.

Journal of the American Chemical Society, v.: 115 13 , p.:5754 - 5761, 1993
Medio de divulgación: Papel
ISSN: 00027863

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

COITIÑO, E.L. , VENTURA, O.N.

Chemical Physics Letters, v.: 202 6 , p.:479 - 482, 1993
Medio de divulgación: Papel
ISSN: 00092614

Moments of energy level distributions in vibrational spectra (Completo, 1993)

KARWOWSKI, J. , BANCEWICZ, M. , VENTURA, O.N. , DIERCKSEN, G.H.F.

Journal of Physics A-Mathematical and General, v.: 26 20 , p.:5581 - 5593, 1993
Medio de divulgación: Papel
ISSN: 03054470

Multi-reference CI calculation of the potential energy curves for OH-bond breaking in the ground and lowest excited states of the water monomer and dimer (Completo, 1993)

SOSA, R.M. , GARDIOL, P. , VENTURA, O.N.

Journal of Molecular Structure, v.: 297 p.:337 - 345, 1993
Medio de divulgación: Papel
ISSN: 00222860

A semi-empirical study of the reaction of the hemimercaptal of methylglyoxal and glutathione at the active center of Glyoxalase I (Completo, 1992)

VENTURA, O.N. , CUBAS, M.L.

International Journal of Quantum Chemistry, v.: 44 5 , p.:699 - 722, 1992
Medio de divulgación: Papel
ISSN: 00207608

Ab initio characterization of possible dissociation pathways for multiphoton ionization of the water dimer in supersonic free jets (Completo, 1992)

SOSA, R.M. , IRVING, K. , VENTURA, O.N.

Journal of Molecular Structure Theochem, v.: 86 p.:453 - 463, 1992
Medio de divulgación: Papel
ISSN: 01661280

Analysis of the gas-phase addition of water to formaldehyde. A semiempirical and ab initio study of bifunctional catalysis by H₂O (Completo, 1992)

VENTURA, O.N. , COITIÑO, E.L. , LLEDOS, A. , BERTRAN, J.

Journal of Computational Chemistry, v.: 13 9 , p.:1037 - 1046, 1992
Medio de divulgación: Papel
ISSN: 01928651

Comparative ab initio and semi-empirical study of hydrogen-bonded complexes of NH₃ and H₂O (Completo, 1992)

COITIÑO, E.L. , VENTURA, O.N. , SOSA, R.M.

Journal of Molecular Structure Theochem, v.: 86 p.:315 - 328, 1992

Medio de divulgación: Papel
ISSN: 01661280

Molecular orbital study of the structures of hydroxamic acids (Completo, 1992)

TURI, L., DANNENBERG, J.J., RAMA, J., VENTURA, O.N.

Journal of Physical Chemistry, v.: 96 9, p.:3709 - 3712, 1992
Medio de divulgación: Papel
ISSN: 00223654

A conformational study of the hemimercaptal of methylglyoxal and glutathione including the study of solvent effects (Completo, 1991)

VENTURA, O.N., CUBAS, M.L.

Journal of the Brazilian Chemical Society, v.: 2 3, p.:111 - 117, 1991
Medio de divulgación: Papel
ISSN: 01035053

Ab initio study of substituent effect on the addition of hydrogen fluoride to fluoroethylenes (Completo, 1990)

SOLA, M., LLEDOS, A., DURAN, M., BERTRAN, J., VENTURA, O.N.

Journal of Computational Chemistry, v.: 11 2, p.:170 - 180, 1990
Medio de divulgación: Papel
ISSN: 01928651

Comparison of semiempirical and BSSE corrected Moller-Plesset ab initio calculations on the direct addition of water to formaldehyde (Completo, 1990)

VENTURA, O.N., COITIÑO, E.L., IRVING, K., IGLESIAS, A., LLEDOS, A.

Journal of Molecular Structure Theochem, v.: 69 p.:427 - 440, 1990
Medio de divulgación: Papel
ISSN: 01661280

Molecular modelling of glutathione: a comparison with crystallographic data (Completo, 1990)

DEBLUMENFELD, M.P., HIKICHI, N., HANSZ, M., VENTURA, O.N.

Journal of Molecular Structure Theochem, v.: 69 p.:467 - 475, 1990
Medio de divulgación: Papel
ISSN: 01661280

Theoretical studies of hydrogen bonded complexes using semiempirical methods (Completo, 1990)

COITIÑO, E.L., IRVING, K., RAMA, J., IGLESIAS, A., DEBLUMENFELD, M.P., VENTURA, O.N.

Journal of Molecular Structure Theochem, v.: 69 p.:405 - 426, 1990
Medio de divulgación: Papel
ISSN: 01661280

AM1 study of hydrogen-bonded complexes of water (Completo, 1989)

VENTURA, O.N., COITIÑO, E.L., LLEDOS, A., BERTRAN, J.

Journal of Molecular Structure Theochem, v.: 56 p.:55 - 68, 1989
Medio de divulgación: Papel
ISSN: 01661280

Theoretical study of reaction mechanisms for the ketonization of vinyl alcohol in gas phase and aqueous solution (Completo, 1987)

VENTURA, O.N., LLEDOS, A., BONACCORSI, R., BERTRAN, J., TOMASI, J.

Theoretica Chimica Acta, v.: 72 3, p.:175 - 195, 1987
Medio de divulgación: Papel
ISSN: 00405744

Theoretical study of the addition of hydrogen halides to olefins: a comparison between (HCl)₂ and (HF)₂ additions to ethylene (Completo, 1987)

CLAVERO, C. , DURAN, M. , LLEDOS, A. , VENTURA, O.N. , BERTRAN, J.

Journal of Computational Chemistry, v.: 8 4 , p.:481 - 488, 1987
Medio de divulgación: Papel
ISSN: 01928651

Solvent intervention in keto-enolic tautomerisms (Completo, 1986)

LLEDOS, A. , BERTRAN, J. , VENTURA, O.N.

Afinidad, v.: 43 p.:486 - 487, 1986
Medio de divulgación: Papel
ISSN: 00019704

Theoretical study of the addition of hydrogen halides to olefins - Reaction of dimeric hydrogen-fluoride with ethylene (Completo, 1986)

CLAVERO, C. , LLEDOS, A. , DURAN, M. , VENTURA, O.N. , BERTRAN, J.

Journal of the American Chemical Society, v.: 108 5 , p.:923 - 928, 1986
Medio de divulgación: Papel
ISSN: 00027863

Water-chain intervention in the ketonization of vinyl alcohol. An ab initio study (Completo, 1986)

LLEDOS, A. , BERTRAN, J. , VENTURA, O.N.

International Journal of Quantum Chemistry, v.: 30 4 , p.:467 - 477, 1986
Medio de divulgación: Papel
ISSN: 00207608

He₂(²⁺). A comparison between Roothan-Hartree-Fock and density functional methods (Completo, 1985)

VENTURA, O.N. , BARTOLUCCI, P. , SOSA, R.M.

International Journal of Quantum Chemistry, v.: 27 5 , p.:625 - 635, 1985
Medio de divulgación: Papel
ISSN: 00207608

On the application of some solvation models to the water dimer (Completo, 1984)

VENTURA, O.N. , BARTOLUCCI, P.

Chemical Physics Letters, v.: 64 4 , p.:229 - 248, 1984
Medio de divulgación: Papel
ISSN: 00092614

Ground-state of the HE₂²⁺ molecular ion computed with density functional techniques (Completo, 1982)

CASTRO, M. , KELLER, J. , VENTURA, O.N.

Journal of Chemical Physics, v.: 77 12 , p.:638 - 6350, 1982
Medio de divulgación: Papel
ISSN: 00219606

Quantum-mechanical study of Methyl fluorofornate (Completo, 1980)

VENTURA, O.N. , SOSA, R.M. , LIBERLES, A.

Chemical Physics Letters, v.: 70 1 , p.:170 - 174, 1980
Medio de divulgación: Papel
ISSN: 00092614

The cis-trans energy difference in Bi-1-cyclopropen-1-yl and related compounds (Completo, 1980)

SOSA, R.M. , VENTURA, O.N. , LIBERLES, A.

Theoretica Chimica Acta, v.: 56 2 , p.:157 - 162, 1980
Medio de divulgación: Papel
ISSN: 00405744

LIBROS

Challenges in Computational Chemical Physics. Quantum Modeling of Complex Molecular Systems (Participación , 2015)

BOTTINELLI, F. , SAENZ.MÉNDEZ, P, VENTURA, O.N.

Número de volúmenes: 21

Edición: ,

Editorial: Springer, Heidelberg

Tipo de publicación: Investigación

DOI: [10.1007/978-3-319-21626-3_14](https://doi.org/10.1007/978-3-319-21626-3_14)

Referado

En prensa

Escrito por invitación

Palabras clave: Proteínas, Enzimas, DFT

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/ISBN: 9783319216256

Financiación/Cooperación:

Comisión Sectorial de Investigación Científica - UDeLaR / Beca, Uruguay

www.springer.com

Dehalopeoxidase A (DHP A) is a detoxifying enzyme found in the marine worm *Amphitrite ornata*. This enzyme converts halophenols found in the environment where the worm lives, into quinones by dehalogenation. The enzyme has globin structure and function, but works also as a peroxidase in the presence of H₂O₂ which binds to the iron present in the heme group. The initial step in the enzymatic reaction path is the transformation of the heme Fe(III) ion into a ferryl (Fe = O) moiety. A distal histidine, His55, is crucial for this process. His55 can occupy two positions, either in the distal pocket of the active center (closed), or exposed to the solvent (open). NMR experiments show that His55 moves between those positions in the resting state of the enzyme. For this process to occur it is necessary that a gate, composed of a triad Asn37-Lys36-Lys51 and two carboxylates on the heme group, suffer a conformational change before and after the passage of the histidine. We examined computationally this process at the B3LYP/6-31G(d,p) level, within a PCM simulated aqueous environment. This analysis leads us to propose a correction of the experimental structure of the enzyme determined by X-ray crystallography and offers an explanation for different conformations of the twin carboxylates at the heme group observed in the crystals. This new proposal agrees with the experimentally determined electron density distributions and explains the role of the His55 as a functional hook for the peroxide in the aqueous media.

Capítulos:

Computational Study of the Initial Step in the Mechanism of Dehaloperoxidase A: Determination of the Protonation Scheme at the Active Site and the Movement of the His55 Residue

Organizadores: Jean Louis Rivail et al

Página inicial 1, Página final 20

New Developments in Quantum Chemistry (Participación , 2009)

VENTURA, O.N., SEGOVIA, M.E. , BADENES, M. P. , KIENINGER, MARTINA, BOTTINELLI, F. , IRVING, K.

Edición: ,

Editorial: Research Signpost, Kerala

En prensa

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química / Química computacional

Medio de divulgación: Papel

ISSN/ISBN:

Capítulos:

Computational Chemistry Tools for the Study of Environmental Chemistry Problems

Organizadores: A. J. Hernández, J. L Paz

Página inicial 109, Página final 164

Structure, Interactions and Reactivity (Participación , 1992)

VENTURA, O.N.

Número de volúmenes: 2

Edición: ,

Editorial: , Amsterdam

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química / Química computacional

Medio de divulgación: Otros

ISSN/ISBN:

Capítulos:

Chemical reactivity

Organizadores: Serafín Fraga

Página inicial 600, Página final 636

Nuevas Tendencias en Química Teórica (Participación , 1991)

VENTURA, O.N.

Edición: ,

Editorial: , Madrid

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química / Química computacional

Medio de divulgación: Otros

ISSN/ISBN:

Capítulos:

Procesos fisicoquímicos elementales y reacciones químicas

Organizadores: Serafín Fraga

Página inicial 249, Página final 278

Temas de Farmacología y Terapéutica Veterinaria (Participación , 1983)

VENTURA, O.N.

Edición: ,

Editorial: , Montevideo

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química / Química computacional

Medio de divulgación: Otros

ISSN/ISBN:

Capítulos:

Modelos de Farmacología Teórica

Organizadores: Juan Hollenweger

Página inicial 75, Página final 114

PUBLICACIÓN DE TRABAJOS PRESENTADOS EN EVENTOS

Computational Approach to the Understanding of Lignin Residues Bleaching by Chlorine Dioxide (2013)

Completo

IRVING, K, VENTURA, O.N.

Evento: Internacional

Descripción: 6th International Colloquium on Eucalyptus Pulp (6th ICEP)

Ciudad: Colonia del Sacramento

Año del evento: 2013

Anales/Proceedings: Proceedings of the 6th International Colloquium on Eucalyptus Pulp (6th ICEP)

Publicación arbitrada

Palabras clave: Madera, DFT, Pulpado

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

<https://drive.google.com/file/d/0B80kL1FdHLbJUldsRkh5bnd3cm8/edit>

A theoretical chemistry study of the species involved in the oxidation of phenol and substituted phenol to quinones by chlorine dioxide has been performed at different computational levels.

Model chemistry calculations employing complete basis sets methods and density functional calculations using one of the most recently derived exchange-correlation functionals and a medium size basis sets were employed for the purpose. Initial complexes, transition states, intermediates and final products in gas phase (or non-dissociating solvents) as well as in bulk water simulated using a polarizable continuum, were investigated. The results show that the reaction with one chlorine dioxide molecule affords a tight molecular complex, where the chlorite ion stays linked to the phenoxyl radical and water. Reaction with a second chlorine dioxide molecule produces several possible intermediates. From them, o- and p-quinone formation are equally probable for phenol, but para substitution is more likely when a methoxy group is present on an ortho carbon in phenol. In this case it is also observed the possible formation of formaldehyde and a ring-opening transition state that may lead to an intermediate which can proceed to muconic acid derivatives after reaction with hydroxide present in the basic media.

Estudios de docking y reactividad de derivados de 2-tiopiridina (2-tp) en catepsina B (CatB) (2013)

Resumen

VEGA-TEIJIDO, M., BONTURI, C., EL CHAMY MALUF, S., SAMBRANO, J. R., VENTURA, O.N.

Evento: Nacional

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

Editorial: Organizadores del 3er Encuentro Nacional de Ciencias Químicas-ENAQUI 3.0

Palabras clave: Química computacional

Áreas de conocimiento:

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

Electroquímica / Química Teórica y Computacional

Medio de divulgación: Papel

La catepsina B (CatB) es una cisteína proteasa humana de la superfamilia de la papaína que actúa en proteólisis y activación de otras proteasas. Su sobreactividad ha sido asociada a diversas patologías[1] como enfermedad de Alzheimer, esclerosis múltiple y cáncer. Los derivados de 2-tiopiridina inhiben covalentemente las cisteína proteasas[2]. En este trabajo presentamos un estudio mediante docking[3] de una serie de 6 compuestos (A-F) y cálculos DFT usando B3LYP/6-31+G** para estudiar la reactividad y selectividad por CatB. Los resultados de docking de la serie muestran un score de unión aumentando en correlación con el tamaño del ligando (con valores entre 37,78 y 77,68 kcal/mol). Para los 3 ligandos mayores (D, E y F) se observa un mejor ajuste al sitio activo y una menor distancia (3,02 - 3,96Å) entre el S de la Cys29 y el S del ligando que reaccionará covalentemente. Los cálculos cuánticos de optimización de sistemas menores (modelados del sistema completo) evidenciaron la necesidad de que un N del ligando inicialmente se protona a expensas de la His199 para poder ser blanco del ataque nucleofílico del tiolato de la Cys29. En todos los casos se protona el N de R3 (en A un anillo 2- piridil). Estos resultados son una base para la comprensión de las características químicas y estructurales que pueden guiar el modelado y optimización de ligandos derivados de 2-tiopiridina como inhibidores de CatB y otras proteasas. [1] Lecaillé, F. et al. Chem. Rev. 2002 102 12:4459-4488. [2] Otto, H. H. & Schirmeister, T. Chem. Rev. 1997 97: 133-171. [3] Programa GOLD: <http://www.ccdc.cam.ac.uk/Solutions/GoldSuite/Pages/GOLD.aspx>

Producción técnica

TRABAJOS TÉCNICOS

(varios) (2008)

Informe o Pericia técnica

VENTURA, O.N.

Divulgación técnica sobre problemas ambientales relacionados con industrias

País: Uruguay

Idioma: Español

Disponibilidad: Irrestringida

Medio de divulgación: Internet

<http://lascosadenestor.blogspot.com>

(varios) (2007)

Informe o Pericia técnica

VENTURA, O.N.

Divulgación técnica sobre problemas ambientales relacionados con industrias

País: Uruguay

Idioma: Español

Disponibilidad: Irrestringida

Medio de divulgación: Internet

<http://ascosasdenestor.blogspot.com>

Otras Producciones

ORGANIZACIÓN DE EVENTOS

Seminars of Molecular Physical Chemistry - III (2002)

VENTURA, O.N., SQUIMO

Congreso

Sub Tipo: Organización

Lugar: Uruguay ,Montevideo

Idioma: Español

Medio divulgación: Otros

Institución Promotora/Financiadora: UDELAR

XXVIII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina (2002)

VENTURA, O.N.

Congreso

Sub Tipo: Organización

Lugar: Uruguay ,Montevideo

Idioma: Español

Medio divulgación: Otros

Duración: 1 semanas

Institución Promotora/Financiadora: UDELAR

Seminars of Molecular Physical Chemistry - II (2001)

VENTURA, O.N., SQUIMO

Congreso

Sub Tipo: Organización

Lugar: Uruguay ,Montevideo

Idioma: Español

Medio divulgación: Otros

Duración: 1 semanas

Institución Promotora/Financiadora: UDELAR

Seminars of Molecular Physical Chemistry - I. (2000)

VENTURA, O.N., SQUIMO

Congreso

Sub Tipo: Organización

Lugar: Uruguay ,Montevideo

Idioma: Español

Medio divulgación: Otros

Duración: 1 semanas

Institución Promotora/Financiadora: UDELAR

Spring Workshop in Quantum Chemistry (1993)

VENTURA, O.N., SPRINGTUM

Congreso

Sub Tipo: Organización

Lugar: Uruguay ,Piriápolis

Idioma: Español

Medio divulgación: Otros

Duración: 1 semanas

Institución Promotora/Financiadora: Comisión de la CE

II Escuela Latinoamericana de Química Teórica (1982)

VENTURA, O.N., SOSA, RAMÓN, M.
Congreso
Sub Tipo: Organización
Lugar: Uruguay ,Montevideo
Idioma: Español
Medio divulgación: Otros
Duración: 2 semanas
Institución Promotora/Financiadora: UDELAR

Evaluaciones

EVALUACIÓN DE PUBLICACIONES

COMITÉ EDITORIAL

Journal of Molecular Modeling (2010 / 2010)

Cantidad: Menos de 5
Evaluador en la actualidad

European Journal of Medicinal Chemistry (2009 / 2010)

Cantidad: Menos de 5
Evaluador en la actualidad

Journal of the Brazilian Chemical Society (2009 / 2010)

Cantidad: Menos de 5
Evaluador en la actualidad

Theoretical Chemistry Accounts (2009 / 2010)

Cantidad: Menos de 5
Evaluador en la actualidad

International Journal of Quantum Chemistry (2006 / 2010)

Cantidad: Menos de 5
Evaluador en la actualidad

Journal of Medicinal Chemistry (2005 / 2007)

Cantidad: Menos de 5

Chemical Physics Letters (2002 / 2010)

Cantidad: Menos de 5
Evaluador en la actualidad

Journal of Physical Chemistry A (2000 / 2010)

Cantidad: Menos de 5
Evaluador en la actualidad

Journal of Molecular Structure Theochem (2000 / 2010)

Cantidad: De 5 a 20
Evaluador en la actualidad

JURADO DE TESIS

Doctorado Facultad de Química (2011 / 2015)

Jurado de mesa de evaluación de tesis
Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química - UDeLaR,
Uruguay
Nivel de formación: Doctorado

Formación de RRHH

TUTORÍAS CONCLUIDAS

POSGRADO

Estudio del movimiento del lazo flexible WPD de la proteína tirosina fosfatasa humana PTP1B y los factores que lo influyen (2011)

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: Aline Katz
Medio de divulgación: Papel
País/Idioma: Uruguay, Inglés
Palabras Clave: bioquímica computacional proteínas
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química / Química
computacional
Tesis en cotutoría con Alberto Podjarny de la Universidad de Estrasburgo. Tesis y defensa
realizadas íntegramente en inglés

Aspectos fisicoquímicos y sintéticos de la oligomerización de ciclohexadienoles quirales (2006)

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: SAENZ, Patricia
Medio de divulgación: Otros
País/Idioma: Uruguay, Español
Los oligoinositoles conocidos tienen solamente un puente que conecta los monómeros, a semejanza
de los oligosacáridos. La presencia de un único puente es deseable para las aplicaciones de estos
compuestos como análogos (miméticos) de sacáridos debido a su semejanza, pero es detrimental
para la rigidez de la molécula. Ya que las propiedades más interesantes parecen provenir de la
disposición tridimensional, que depende directamente de la rigidez, es deseable contar con
oligoinositoles más rígidos. Una de las modificaciones más directas para lograr este fin consiste en
aumentar el número de puentes entre los monómeros. Se propone entonces la preparación de
oligociclitolos (oligoinositoles y oligoconduritolos) con dos puentes de unión entre los monómeros,
para realizar el estudio teórico y experimental de sus propiedades moleculares. La estructura de
estos compuestos es totalmente nueva, no existiendo antecedentes de ciclitolos unidos entre sí por
más de un puente

Química en solución acuosa de dioxocomplejos Re (V) (2005)

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: GANCHEFF, Jorge
Medio de divulgación: Otros
País/Idioma: Uruguay, Español

Estudio teórico y experimental de la conducción eléctrica del sistema YBa₂Cu₃-xMxO₇-delta (M=Fe, Co, Ni, Mn) en función de la sustitución química (2004)

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: RABUFFETTI, Federico

Medio de divulgación: Otros

País/Idioma: Uruguay, Español

El Plan de Trabajo del Postulante se centrará en el estudio experimental y computacional de compuestos en la serie $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{-xMxO}_7\text{-d}$ ($M = \text{Fe, Co, Ni, Mn}$). Esta serie está basada en el compuesto original $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7\text{-d}$ (YBCO), que es un cerámico superconductor a temperaturas inferiores a 92K. Este cerámico presenta líneas de Cu^{3+} y planos de Cu^{2+} , siendo estos últimos los responsables de la existencia de superconductividad. Este compuesto tiene comportamiento metálico a temperatura ambiente, pero éste se ve afectado cuando el compuesto se dopa con metales de transición que sustituyen al ion Cu^{2+} en los planos CuO_2 . El interés en este sistema se ha visto reforzado recientemente por su capacidad de transferencia de iones oxo a través de los defectos inherentes a la estructura cristalina, lo que potencialmente es valioso por su posible empleo como membranas en celdas combustibles (SOFC, solid oxide fuel cells). Esta posible aplicación, de gran proyección tecnológica, depende de la disminución de la conductividad eléctrica del compuesto para impedir el cortocircuito del dispositivo. Esta disminución puede lograrse a través del dopado. Por lo tanto, el estudio de este sistema es importante tanto desde el tradicional enfoque de la superconductividad de alta temperatura crítica, como a partir de las aplicaciones más novedosas a nivel tecnológico, como es el caso de las celdas combustibles. En este trabajo de Maestría, se plantea una parte experimental que consistirá en la síntesis y determinación estructural de compuestos de la serie $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{-xMxO}_7\text{-d}$ ($M = \text{Fe, Co, Ni, Mn}$), los que, además, serán caracterizados desde el punto de vista eléctrico a través de su resistencia. Desde el punto de vista computacional, entretanto, se realizará un estudio de la estructura electrónica de los componentes de la serie. Para ello se emplearán programas de cálculo que permitan el estudio de bandas de los compuestos, empleando métodos de funcionales de la densidad para sistemas periódicos

Estudio teórico computacional de reacciones químicas de interés atmosférico (2004)

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: DENIS, Pablo

Medio de divulgación: Otros

País/Idioma: Uruguay, Español

Estudio computacional de la química atmosférica de los radicales CF_3O . Una contribución a la comprensión de las transformaciones de las especies hidrofluorocarbonadas en la atmósfera (2004)

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: SEGOVIA, Marc

Medio de divulgación: Otros

País/Idioma: Uruguay, Español

Estudio teórico computacional de reacciones químicas de interés atmosférico (2000)

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: DENIS, Pablo

Medio de divulgación: Otros

País/Idioma: Uruguay, Español

Estudio teórico-experimental de dioxo complejos de Re(V) y Tc(V) (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: GANCHEFF, Jorge

Medio de divulgación: Otros

País/Idioma: Uruguay, Español

Estudio MRCI de los estados excitados bajos del dímero de agua (1995)

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: VILA, Fernando
Medio de divulgación: Otros
País/Idioma: Uruguay, Español

Estudio teórico computacional de la reacción catalizada por la enzima glioxalasa (1993)

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: CUBAS, María Luisa
Medio de divulgación: Otros
País/Idioma: Uruguay, Español

Estudio teórico-experimental del efecto del H₂O sobre las reacciones de condensación aldólica del acetaldehído (1991)

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: COITIÑO, Elena Laura
Medio de divulgación: Otros
País/Idioma: Uruguay, Español

Influencia de la estructura superficial del platino en la electrorreducción del oxígeno molecular (1991)

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: ZINOLA, Carlos Fernando
Medio de divulgación: Otros
País/Idioma: Uruguay, Español

GRADO

Computational Approach to the Understanding of Lignin Residues Bleaching by Chlorine Dioxide (2013)

Tesis/Monografía de grado
Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química - UDeLaR ,
Uruguay
Programa: Licenciatura en Química
Tipo de orientación: Tutor único o principal
Nombre del orientado: Kenneth Irving
Medio de divulgación: Papel
País/Idioma: Uruguay, Español
Palabras Clave: Madera, pulpado, DFT
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Química Teórica y Computacional
A theoretical chemistry study of the species involved in the oxidation of phenol and substituted phenol to quinones by chlorine dioxide has been performed at different computational levels. Model chemistry calculations employing complete basis sets methods and density functional calculations using one of the most recently derived exchange-correlation functionals and a medium size basis sets were employed for the purpose. Initial complexes, transition states, intermediates and final products in gas phase (or non-dissociating solvents) as well as in bulk water simulated using a polarizable continuum, were investigated. The results show that the reaction with one chlorine dioxide molecule affords a tight molecular complex, where the chlorite ion stays linked to the phenoxyl radical and water. Reaction with a second chlorine dioxide molecule produces several possible intermediates. From them, o- and p-quinone formation are equally probable for phenol, but para substitution is more likely when a methoxy group is present on an ortho carbon in phenol. In this case it is also observed the possible formation of formaldehyde and a ring-opening transition state that may lead to an intermediate which can proceed to muconic acid derivatives after reaction with hydroxide present in the basic media.

TUTORÍAS EN MARCHA

POSGRADO

Estudio del mecanismo de acción de dehaloperoxidasas (2008)

Tesis de doctorado
Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química - UDeLaR,
Uruguay
Programa: Doctorado en Química
Nombre del orientado: Fiorentina Bottinelli
Medio de divulgación: Papel
País/Idioma: Uruguay, Español
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química / Química
computacional

GRADO

Estudio computacional de la molécula de insulina (2015)

Tesis/Monografía de grado
Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química - UDeLaR,
Uruguay
Programa: Licenciatura en Química
Tipo de orientación: Tutor único o principal
Nombre del orientado: Francisco Laviano
Medio de divulgación: Papel
País/Idioma: Uruguay, Español
Palabras Clave: Química Teórica Insulina
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Química Teórica y Computacional

OTRAS

Estudio Teórico Computacional de las reacciones de 2-fluoropropeno con Cl y OH (2015)

Orientación de posdoctorado
Sector Extranjero/Internacional/Otros / Institución Extranjera / Universidad Nacional de Córdoba,
Uruguay
Tipo de orientación: Asesor/Orientador
Nombre del orientado: Cynthia Rívela
Medio de divulgación: Papel
País/Idioma: Uruguay, Español
Palabras Clave: Química atmosférica Química Teórica
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Química Teórica y Computacional
Formación de la estudiante en el uso del cluster para la realización de cálculos DFT sobre los
compuestos citados. Además, cálculos de estados de transición, caminos de reacción y constantes
de velocidad de reacción, empleando la teoría variacional del estado de transición. Se enmarca
dentro de la tesis de doctorado de la estudiante (realizándose en la Universidad e Córdoba) sobre
estudios teóricos y experimentales de las reacciones en la atmósfera de hidrocarburos insaturados
halogenados.

Otros datos relevantes

PREMIOS, HONORES Y TÍTULOS

Investigador Principal G5 (2014)

(Nacional)
Peduciba
Reevaluado por árbitros internacionales y confirmado como Investigador Principal, G5, del
Peduciba, 25/6/2014

Profesor Titular Efectivo (G5) de Facultad de Química (2013)

(Nacional)
Facultad de Química, UdelaR
Confirmado como Profesor Titular (G5) de Facultad de Química, Diciembre 2013

Sistema Nacional de Investigadores Nivel III (2012)

(Nacional)
ANII
Fui evaluado y seleccionado por segunda vez como Investigador Grado III del SNI en el año 2012.

Fondo Nacional de Investigadores 2002-2004 (2005)

MEC, CONICYT

Premio Roberto Caldeyro Barcia (1999)

PEDECIBA-PNUD, Uruguay

Fondo Nacional de Investigadores 1999-2001 (1999)

MEC, CONICYT Uruguay

Mejor artículo de revisión en Química Cuántica (1992)

Folia Chimica Theoretica Latina

Premio Mejor Investigador Joven en Química (1991)

MEC-CONICYT, Uruguay-TWAS, Italia

Premio Nacional de Proyectos de Investigación (1981)

MEC, CONICYT, Uruguay

PRESENTACIONES EN EVENTOS

3er Encuentro Nacional de Ciencias Químicas-ENAQUI 3.0, Montevideo, Uruguay (2013)

Congreso
Estudios de docking y reactividad de derivados de 2-tiopiridina (2-tp) en catepsina B (CatB)
Uruguay
Tipo de participación: Poster
Carga horaria: 40
Nombre de la institución promotora: Pedeciba Química
Palabras Clave: docking Química computacional Tirosina proteasas
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular / Química Teórica y Computacional
La catepsina B (CatB) es una cisteína proteasa humana de la superfamilia de la papaína que actúa en proteólisis y activación de otras proteasas. Su sobreactividad ha sido asociada a diversas patologías[1] como enfermedad de Alzheimer, esclerosis múltiple y cáncer. Los derivados de 2-tiopiridina inhiben covalentemente las cisteína proteasas[2]. En este trabajo presentamos un estudio mediante docking[3] de una serie de 6 compuestos (A-F) y cálculos DFT usando B3LYP/6-31+G** para estudiar la reactividad y selectividad por CatB. Los resultados de docking de la serie muestran un score de unión aumentando en correlación con el tamaño del ligando (con valores entre 37,78 y 77,68 kcal/mol). Para los 3 ligandos mayores (D, E y F) se observa un mejor ajuste al sitio activo y una menor distancia (3,02 - 3,96Å) entre el S de la Cys29 y el S del ligando que reaccionará covalentemente. Los cálculos cuánticos de optimización de sistemas menores (modelados del sistema completo) evidenciaron la necesidad de que un N del ligando inicialmente se protona a expensas de la His199 para poder ser blanco del ataque nucleofílico del tiolato de la Cys29. En todos los casos se protona el N de R3 (en A un anillo 2- piridil). Estos resultados son una base para la comprensión de las características químicas y estructurales que pueden guiar el modelado y optimización de ligandos derivados de 2-tiopiridina como inhibidores de CatB y otras

proteasas. [1] Lecaillie, F. et al. Chem. Rev. 2002 102 12:4459-4488. [2] Otto, H. H. & Schirmeister, T. Chem. Rev. 1997 97: 133-171. [3] Programa GOLD:
<http://www.ccdc.cam.ac.uk/Solutions/GoldSuite/Pages/GOLD.aspx>

XVIII Simposio Nacional de Química Orgánica (2011)

Congreso

Estudio computacional de la especificidad por sustrato de la proteína FTO asociada al riesgo de obesidad

Argentina

Tipo de participación: Poster

Palabras Clave: bioquímica computacional proteínas docking

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química / Bioquímica computacional

- Patricia Saenz Méndez, Maitia Labora, Aline Katz, Oscar N. Ventura. Estudio computacional de la especificidad por sustrato de la proteína FTO asociada al riesgo de obesidad XVIII Simposio Nacional de Química Orgánica, 2011, Carlos Paz, República Argentina.

XVIII Simposio Nacional de Química Orgánica, (2011)

Congreso

Diseño computacional de reacciones multicomponente para la síntesis de productos naturales y farmacéuticos

Argentina

Tipo de participación: Poster

Palabras Clave: reacciones multicomponente Química computacional

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química / Química computacional

- Eduardo Bermúdez, Oscar N. Ventura, Patricia Saenz Méndez. Diseño computacional de reacciones multicomponente para la síntesis de productos naturales y farmacéuticos XVIII Simposio Nacional de Química Orgánica, 2011, Carlos Paz, República Argentina.

Segundo Encuentro Nacional de Ciencias Químicas ENAQUI 2011 (2011)

Congreso

Diseño computacional de reacciones multicomponente para la síntesis de motivos estructurales recurrentes en productos naturales

Uruguay

Tipo de participación: Poster

Nombre de la institución promotora: Pedeciba

Palabras Clave: reacciones multicomponente Química computacional

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química / Química computacional

- Eduardo Bermúdez, Oscar N. Ventura, Patricia Saenz Méndez. Diseño computacional de reacciones multicomponente para la síntesis de motivos estructurales recurrentes en productos naturales Segundo Encuentro Nacional de Ciencias Químicas ENAQUI 2011, 2011, Montevideo, Uruguay.

Segundo Encuentro Nacional de Ciencias Químicas ENAQUI 2011 (2011)

Congreso

Estudio computacional de la oxidación de tiolatos con peróxido de hidrógeno como modelo del rol de cisteínas en oxidorreductasas

Uruguay

Tipo de participación: Poster

Nombre de la institución promotora: Pedeciba

Palabras Clave: bioquímica computacional

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química / Bioquímica computacional

- Camila Lacroze, Patricia Saenz Méndez, Oscar N. Ventura. Estudio computacional de la oxidación de tiolatos con peróxido de hidrógeno como modelo del rol de cisteínas en oxidorreductasas Segundo Encuentro Nacional de Ciencias Químicas ENAQUI 2011, 2011, Montevideo, Uruguay.

Ninth Triennial Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists, WATOC 2011 (2011)

Congreso

Insights into the structural basis of microtubule stabilizing antitumoral agents (MSAAs) activity. Prediction of the binding modes of Taxol and Laulimalide

España

Tipo de participación: Poster

Nombre de la institución promotora: Universidad de Santiago de Compostela

Palabras Clave: bioquímica computacional Química computacional

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química / Bioquímica computacional

- Patricia Saenz Méndez, Gaston Pais, Gustavo Seoane, Oscar N. Ventura. Insights into the structural basis of microtubule stabilizing antitumoral agents (MSAAs) activity. Prediction of the binding modes of Taxol and Laulimalide Ninth Triennial Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists, WATOC 2011, 2011, Santiago de Compostela, España.

Ninth Triennial Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists, WATOC 2011 (2011)

Congreso

Computational study on how protonation changes affect some structural factors of Dehaloperoxidase A

España

Tipo de participación: Poster

Nombre de la institución promotora: Universidad de Santiago de Compostela

Palabras Clave: bioquímica computacional proteínas

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química / Bioquímica computacional

- Fiorentina Bottinelli, Patricia Saenz Méndez, Oscar N. Ventura. Computational study on how protonation changes affect some structural factors of Dehaloperoxidase A Ninth Triennial Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists, WATOC 2011, 2011, Santiago de Compostela, España.

Ninth Triennial Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists, WATOC 2011 (2011)

Congreso

Determination of chloride, bromide and iodide ions parameters for use in molecular simulations of TIP3P compatible solvated systems with CHARMM27 force field

España

Tipo de participación: Poster

Nombre de la institución promotora: Universidad de Santiago de Compostela

Palabras Clave: Química computacional campos de fuerza

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química / Bioquímica computacional

- Aline Katz, Patricia Saenz-Méndez, Alexandra Cousido-Siah, Andre Mitschler, Alberto Podjarny, Oscar N. Ventura. Determination of chloride, bromide and iodide ions parameters for use in molecular simulations of TIP3P compatible solvated systems with CHARMM27 force field Ninth Triennial Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists, WATOC 2011, 2011, Santiago de Compostela, España.

XVI Brazilian Symposium on Theoretical Chemistry (2011)

Congreso

Computational study of the lipscomb and lindskog reaction paths for hydrolytic Zn enzymes.

Brasil

Tipo de participación: Expositor oral

Nombre de la institución promotora: Sociedad Brasileira de Química Teórica

Palabras Clave: bioquímica computacional Química computacional enzimas biomiméticos

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química / Bioquímica ambiental

Segundo Encuentro Nacional de Ciencias Químicas ENAQUI 2011 (2011)

Congreso

Estudio teórico del mecanismo de inhibición de cisteína proteasas por derivados de 1,2,4-tiadiazol (1,2,4-TDZ)

Uruguay

Tipo de participación: Poster

Nombre de la institución promotora: Pedeciba

Palabras Clave: bioquímica computacional

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química / Química computacional

Mauricio A. Vega-Tejido;1 Sarah El Chamy Maluf;2 Camila Bonturi;2 Júlio R. Sambrano2 y Oscar N. Ventura1 "Estudio teórico del mecanismo de inhibición de cisteína proteasas por derivados de 1,2,4-tiadiazol (1,2,4-TDZ). Segundo Encuentro Nacional de Ciencias Químicas (ENACQUI 2011), organizado por PEDECIBA-Química, 24 al 26 de octubre de 2011, Torre de las Comunicaciones- ANTEL, Montevideo

9nas Jornadas Red Temática de Medio Ambiente (2011)

Simposio

Minería de gran escala: sí, pero...

Uruguay

Tipo de participación: Expositor oral

Nombre de la institución promotora: RETEMA, UDELAR

Palabras Clave: minería ambiente

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química / Química ambiental

International Symposium Thiol Metabolism and Redox Regulation of Cellular Functions (2011)

Simposio

Modeling and docking studies of 1,2,4-thiadiazole and 2-thiopyridine derivatives in the active site of the cysteine protease cathepsin B

Uruguay

Tipo de participación: Poster

Nombre de la institución promotora: Udelar - Instituto Pasteur

Palabras Clave: bioquímica computacional

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química / Química computacional

VEGA-TEIJIDO, M., EL CHAMY MALUF, S., BONTURI, C., VENTURA, ON, SAMBRANO, JR
Modeling and docking studies of 1,2,4-thiadiazole and 2-thiopyridine derivatives in the active site of the cysteine protease cathepsin B. In: International Symposium Thiol Metabolism and Redox Regulation of Cellular Functions, 2011, Casa Pueblo, Punta Ballena, Maldonado, Uruguay.

Segundo Encuentro Nacional de Ciencias Químicas ENACQUI 2011 (2011)

Congreso

Análisis de los factores estructurales responsables de la actividad de agentes estabilizadores de microtúbulos (MSAA). Predicción de los sitios de unión de Taxol y de Laulimalida

Uruguay

Tipo de participación: Poster

Nombre de la institución promotora: Pedeciba

Palabras Clave: Química computacional

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química / Química computacional

- Gastón Pais, Gustavo Seoane, Oscar N. Ventura, Patricia Saenz Méndez. Análisis de los factores estructurales responsables de la actividad de agentes estabilizadores de microtúbulos (MSAA). Predicción de los sitios de unión de Taxol y de Laulimalida Segundo Encuentro Nacional de Ciencias Químicas ENACQUI 2011, 2011, Montevideo, Uruguay.

Computational Modelling and Simulations of Biological Systems (2010)

Seminario

Molecular Simulations in the South of the World

Brasil

Tipo de participación: Conferencista invitado

Nombre de la institución promotora: Instituto Pasteur Uruguay

Palabras Clave: Química computacional

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química / Química computacional

Computational Modelling and Simulations of Biological Systems (2010)

Seminario

Hamiltonians

Uruguay

Tipo de participación: Conferencista invitado

Nombre de la institución promotora: Instituto Pasteur Uruguay

Palabras Clave: Química computacional

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química / Química computacional

XVII-Simposio Nacional de Química Orgánica (2009)

Congreso

Estudio teórico de la biosíntesis de la lignina

Argentina

Tipo de participación: Poster

Palabras Clave: Química computacional lignina

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química / Química computacional

- Patricia Saenz Méndez, Oscar N. Ventura. Estudio teórico de la biosíntesis de la lignina XVII-Simposio Nacional de Química Orgánica, 2009, Mendoza, República Argentina.

QUITEL-2009-XXXV Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina (2009)

Congreso

Estudio DFT de un mecanismo alternativo de apertura de epóxidos con eterato de trifluoruro de boro para dar syn-fluorohidrininas

Colombia

Tipo de participación: Poster

Palabras Clave: Química computacional DFT Físicoquímica orgánica

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química / Química computacional

- Patricia Saenz Méndez, Gustavo Seoane, Oscar N. Ventura. Estudio DFT de un mecanismo alternativo de apertura de epóxidos con eterato de trifluoruro de boro para dar syn-fluorohidrininas QUITEL-2009-XXXV Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina, 2009, San Andrés, Colombia.

QUITEL-2009-XXXV Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina (2009)

Congreso

Estudio experimental y computacional de reacciones químicas del ácido peroxocarbónico con subproductos de descomposición de la lignina en CO₂ supercrítico

Colombia

Tipo de participación: Poster

Palabras Clave: Química computacional

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química / Química computacional

- Patricia Saenz Méndez, Virginia Aldabalde, Oscar N. Ventura. Estudio experimental y computacional de reacciones químicas del ácido peroxocarbónico con subproductos de descomposición de la lignina en CO₂ supercrítico QUITEL-2009-XXXV Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina, 2009, San Andrés, Colombia.

Latin American School of Materials Science (2009)

Congreso

DFT on atmospheric chemistry

Chile

Tipo de participación: Expositor oral

Nombre de la institución promotora: Universidad de Chile

Palabras Clave: Química computacional Química atmosférica

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química / Química computacional

Congreso

Sarcosina oxidase monomérica, um sistema biológico capaz de evidenciar as diferenças supramoleculares da família dos calcogênios

Brasil

Tipo de participación: Poster

Nombre de la institución promotora: Sociedad Brasileira de Química Teórica

Palabras Clave: bioquímica computacional

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química / Química computacional

VEGA-TEIJIDO MA; VENTURA, O.N.; ZUKERMAN-SCHPECTOR, J. Sarcosina oxidase monomérica, um sistema biológico capaz de evidenciar as diferenças supramoleculares da família dos calcogênios. In: XV Simpósio Brasileiro de Química Teórica, 2009. Poços de Caldas, MG, Brasil. Livro de Resumos do XV Simpósio Brasileiro de Química Teórica. 2009

Información adicional

ESTADÍSTICAS DE PUBLICACIÓN

Total de artículos publicados en revistas con referato.....	108
Total presentes en Scholar.....	108
Total presentes en Thomson WOK.....	101
Citas colectadas por el artículo más citado (Scholar).....	65
Citas colectadas por el artículo más citado (Thomson WOK).....	75
Total de citas Scopus a los artículos allí presentes.....	1450
Total de citas Thomson WOK.....	1302
Factor de Impacto (Thomson WOK).....	12.89
h-factor (Thomson).....	21
h-factor (Scholar).....	22

PRODUCCIÓN PUBLICADA COMO AUTOR NO CIENTÍFICO

Paralelamente a mi carrera científica, desarrollo actividades de extensión universitaria sobre aspectos de divulgación científica relacionados con la contaminación ambiental. He publicado más de 160 artículos (171 en total, pero algunos son solo de estructura del sitio) con un total de 9,630 comentarios. Desde Diciembre de 2007 en que se activó el blog, se han leído 222,986 páginas, por parte de 136,812 usuarios únicos, de los cuales una tercera parte son usuarios retornantes. Parte del material aquí publicado se empleó a favor de Uruguay en el juicio de La Haya y ahí demostré a fines de 2008 aproximadamente, que el río Gualeguaychú producía contaminación en el río Uruguay, cosa que en 2011 han confirmado los estudios de laboratorios canadienses que Argentina se niega a divulgar en la CARU. A raíz de estas informaciones se me realizaron numerosas entrevistas en la prensa escrita, radial y televisada, una reseña incompleta de las cuales puede verse en <http://lascosasdenestor.blogspot.com/p/novedades.html> (28/03/2014)

Extensión

- Creador, autor y administrador del blog Las Cosas de Néstor (<http://lascosasdenestor.blogspot.com>) para el empoderamiento de la sociedad civil mediante la transmisión de conocimientos en áreas técnicas (pasteras, energía, contaminación, ambiente y desarrollo). 13/10/2007-presente. Más de 170 artículos técnicos y de opinión publicados, 282.370 páginas vistas, 9.687 comentarios.

- Editor de la sección "Voces Tecnológicas" para el Semanario Voces, 2014-2015
- Editor del periódico electrónico diario El Telescopio (<http://www.eltelescopio.com.uy>), 2015-

Conferencias de divulgación

"*Calidad en Educación Superior en Contextos de Masividad*", Facultad de Química, Mesa redonda moderada por el Pro-Rector de Enseñanza, 29 de septiembre de 2015

"*Una forma diferente de hacer Química*", Jornada Taller Regional de Actualización Docente en Química, Liceo N° 1 de Fray Bentos, Sábado 12 de mayo de 2012

"*Qué minería para qué desarrollo*", 9as Jornadas Red Temática de Medio Ambiente (RETEMA), Facultad de Ciencias, UdelaR, 27-28 de octubre de 2011

Publicaciones de divulgación

2015/09/18 – (El Telescopio, Uruguay) [Rankings de Universidades: medir o no medir \(III\)](#)

2015/08/23 – (El Telescopio, Uruguay) [Los rankings universitarios \(II\). QS, amigos son los](#)

[amigos.](#)

2015/08/03 – (El Telescopio, Uruguay) [Markarián tiene razón y no la tiene \(I\)](#)

2015/07/01 – (El Telescopio, Uruguay) [¿Perderás tu trabajo por un robot?](#)

2015/06/01 – (El Telescopio, Uruguay) [Competitividad y la ciencia encorsetada](#)

2015/02/05 – (Voces N°460, pág.14) Herramientas sociales para el investigador: Google Scholar.

2014/12/11 – (Voces N°459, pág.14) La computadora, un laboratorio químico.

2014/10/09 – (Voces N°450, pág.15) La Ciencia y su medida: si no lo puedes medir, no lo puedes controlar.

2014/09/25 – (Voces N°448, pág.4) Confieso que he pecado.

2014/02/13 – (Voces N°417, pág.15) ¿Dónde estamos? ¿Hacia dónde vamos?

2013/12/21 -- (Semnario Voces, Montevideo, Uruguay) [Intentando desarrollar un modelo de aproximación al narcotráfico](#)

2013/10/18 -- (Semnario Voces, Montevideo, Uruguay) [Dejar de actuar al golpe de balde](#)

2013/08/01 -- (Semnario Voces, Montevideo, Uruguay) [¿País de primera con necesidades básicas insatisfechas?](#)

2013/06/20 – (Diario Cambio, Salto, Uruguay) [Una forma alternativa de cubrir el costo universitario](#)

2013/05/31 – (Diario Cambio, Salto, Uruguay) [La aparente gratuidad de la Udelar y su injusticia social](#)

· [Entrevistas](#)

2015/04/18 – (El País, Uruguay, por V. Ruggiero y J.P.Correo) [El agua pierde por goleada](#). Óscar Ventura, profesor catedrático grado 5 de la Facultad de Química de la Universidad de la República (Udelar), explica que la contaminación en los espejos de agua de Uruguay se originó por la falta de control de lo que se vierte...

2014/12/11 – (Opinar N°279, Uruguay, por Fabricio Suárez) [Los líderes no se compran en la feria](#). El catedrático grado 5 de la Universidad de la República, Oscar Ventura, afirmó que "el deterioro de la educación y el incremento de la criminalidad juegan a favor del clientelismo básico..."

2013/11/14 -- (Ámbito Financiero, Argentina) [Desembarco papal en el conflicto por Botnia](#) "A mí en el Vaticano me habían preguntado qué está pasando, 'pásennos datos fidedignos, confiables'. Yo les había enviado una intervención de un catedrático de química, Oscar Ventura, y algunas otras cosas confiables respecto de los números que se manejan del lado argentino", contó el religioso en diálogo con el portal oriental 10 Minutos."

2013/10/29 -- (Sabendo más de Ud., Radio Vamos) El programa "Sabendo más de Usted", que conducen Marcos Harispe y Federico Correa, [entrevistó al Dr. Oscar Ventura](#), grado 5 en la Facultad de Química y asesor del senador Pedro Bordaberry.

2013/10/25 -- (Canal 12, Calidad de Vida) [¿UPM contamina?](#)

Argentina dice que la planta contamina y amenaza con ir a la Corte Internacional de La Haya pero Uruguay asegura que no. Analizamos el tema junto a tres expertos.

2013/10/24 -- (Nuevo Siglo TV, El Ambiente en el Medio) [UPM y la contaminación del río Uruguay](#)

2013/10/24 -- (Radio Finlandesa YLE, periodista Jaana Kanninen) Maailmanpolitiikan arkipäivää, [Tuliko Välimerestä kuoleman meri?](#)

2013/10/23 -- (Canal 4, Santo y Señá)

2013/10/21 -- (Living Planet, Deutsche Welle) [Living Planet](#)

2013/10/18 -- (Semnario Voces, Montevideo, Uruguay) [Dejar de actuar al golpe de balde](#). Por Oscar Ventura

2013/10/17 -- (El Bocón, Montevideo, Uruguay) [BRILLANTE EDITORIAL DEL INGENIERO QUÍMICO OSCAR VENTURA EN DIARIO CAMBIO DE SALTO](#). Las relaciones entre ambos países en lo que concierne a la administración del río limítrofe compartido están reguladas por el Estatuto y el Digesto del río Uruguay. En ellos se distingue claramente lo que concierne a la calidad de las aguas del río, que es una cosa, y lo que concierne a los efluentes, que es otra. Lo primero es lo que está regulado por la CARU, los valores estándar, o límites que no deben ser superados, para que las aguas puedan ser aprovechadas correctamente por ambos países están establecidos en el Digesto.

2013/10/13 -- (Diario Cambio, Salto, Uruguay) [Y la luz se hizo](#) por Oscar Ventura. Y no había ningún monstruo bajo la cama, mire Ud. Se conocieron los datos de los análisis realizados por los laboratorios canadienses contratados por la CARU para respaldar el trabajo de la comisión binacional de científicos que monitorea UPM y la desembocadura del río Gualaguaychú.

Oficialmente, mediante un discurso bastante agresivo y culpabilizador, y mediante publicaciones en la web, se conocieron las acusaciones argentinas acerca de los reiterados incumplimientos de UPM, según ellos. Del lado uruguayo no ha habido reacción oficial, más allá de una tibia respuesta inicial, y no se conocen los mismos datos que los argentinos han publicado.

2013/10/12 -- (CausaAbierta, Montevideo, Uruguay) [Letal contraataque de Uruguay: El Río Gualaguaychú contamina miles de veces más que UPM](#). El químico grado 5, Oscar Ventura –

asesor del senador Pedro Bordaberry–, señaló a El Observador que la contaminación del Gualaguaychú es, en fósforo, 120 veces superior a la de UPM; en hierro vierte 14.034 veces más

kilos por día que la pastera; y en cromo, aporta 682 veces más kilos por día que la fábrica de celulosa.

2013/10/12 -- (El Observador, Montevideo, Uruguay) [El Río Gualaguaychú contamina miles de veces más que UPM](#). ...El químico grado 5, Oscar Ventura –asesor del senador Pedro Bordaberry –, señaló a El Observador que la contaminación del Gualaguaychú es, en fósforo, 120 veces superior a la de UPM; en hierro vierte 14.034 veces más kilos por día que la pastera; y en cromo, aporta 682 veces más kilos por día que la fábrica de celulosa.

2013/10/11 -- (Brecha, Montevideo, Uruguay) [Química para principiantes](#). UPM y la 'guerra sucia' de información. En cuanto a la temperatura, los científicos consultados por Brecha coinciden, en este punto, con la biblioteca esgrimida por las autoridades uruguayas: aplicar los estándares del digesto a los efluentes “es como pretender que las aguas servidas tengan que salir con la misma calidad que la del río, lo que carece totalmente de lógica”, explica el doctor en química grado 5 Oscar Ventura (Facultad de Química-Udelar).

2013/10/11 -- (LR21, Montevideo, Uruguay) [Larrañaga: “El canciller argentino, Héctor Timerman, miente](#). Larrañaga hizo referencia a expresiones del químico Oscar Ventura, y al editorial realizado por Esteban Valenti, los cuales expresan el hecho de la “no contaminación de la planta de celulosa.

2013/10/11 -- (Montevideo.com, Web) [La ciencia de la política](#). Para el Dr. Oscar Ventura, Grado Cinco de la Facultad de Química (Udelar), la polémica por UPM “es un tema político, no científico”. Ventura dijo a Montevideo Portal que los parámetros que utiliza Argentina para medir la contaminación del Río Uruguay “son incorrectos”. Advirtió que recurrir a La Haya sería “contraproducente” para Argentina.

2013/10/11 -- (América Economía, Web) [Gobierno uruguayo no negocia su decisión por UPM y espera ir a La Haya](#). El científico uruguayo Oscar Ventura, asesor del senador Pedro Bordaberry, coincidió con Rucks en que UPM no contamina y dijo que los 40 parámetros que se controlan están por debajo de los límites permitidos.

2013/10/11 -- (Radio El Espectador, Montevideo, Uruguay, con Emiliano Cotel) Doctor en Química Oscar Ventura: [informe argentino comete error técnico al aplicar parámetros del río a efluentes de UPM](#) (vea aquí el [video de la entrevista](#))

2013/10/11 -- (El Espectador, Montevideo, Uruguay) [Ventura: "Timerman miente por ignorancia o mala fe"](#). En diálogo con En Perspectiva, el doctor en Química Oscar Ventura, catedrático de la Universidad de la República, explicó los motivos por los cuales afirma que los argumentos y datos brindados por el canciller argentino Héctor Timerman en contra del funcionamiento de la planta de UPM "son mentira". Durante su argumentación, Ventura se refirió al debate sobre la temperatura del agua, las concentraciones en los efluentes y hasta el uso de endosulfán.

2013/10/11 -- (Todo el campo, Uruguay, Web) Químico Oscar Ventura, contundente, ["UPM no contamina"](#)

2013/10/10 -- (RadioUruguay, Montevideo, Uruguay) ["UPM no contamina", según datos del laboratorio canadiense que estudia el río Uruguay](#). “UPM no contamina, todos los parámetros que se controlan están por debajo de sus límites. En la mayoría de los casos, muy por debajo de los límites”, aseguró Oscar Ventura, científico de la Universidad de la República, al programa Código País.

2013/10/10 -- (Radio Continental, Buenos Aires, Argentina con Nelson Castro) [Científico uruguayo: “Ninguna de las sustancias que se arrojan al río excede los parámetros”](#) Oscar Ventura es doctor en Química y asesor en su materia en el país vecino. Ambos países tienen los mismos datos, el tema es la interpretación que hace cada uno.

2013/10/10 -- (Tiempo, Mercedes, Uruguay) [Terrible error de Timerman](#). Urgando en internet, Alejandro Villaverde encontró datos proporcionados por el Dr. Oscar Ventura, que ha adecuado a esta publicación.

2013/10/10 -- (Canal 12, Código País, con Antonio Ladra y Aldo Silva) [El conflicto interminable: segunda parte](#). ¿UPM contamina o no? Recibimos al doctor en química y catedrático grado 5 de la Universidad de la República, Oscar Ventura.

2013/10/07 -- (Radio Universal, Fuentes Confiables, Uruguay, con Aldo Silva) Entrevista en el programa Fuentes Confiables al Químico Oscar Ventura ([escuchar entrevista](#)).

2013/10/07 -- (Telebuen día, Canal 4, Uruguay, con Daniel Castro) Entrevista al Dr. en Química Oscar Ventura. UPM, [la planta de la discordia](#).

2013/10/07 -- (La Opinión Popular, Entre Ríos, Argentina) [¿El gobierno de Urribarri le exige a las empresas entrerrianas lo mismo que a UPM?](#) "Las mejoras solicitadas por el Presidente uruguayo a UPM son innecesarias y no mejorarán ni empeorarán la salud del río Uruguay", sostiene el catedrático uruguayo de la Universidad de la República, Dr. Oscar Ventura.

2013/10/06 -- (Día a Día Digital, Concordia, Argentina) [Según un catedrático uruguayo, la temperatura de los efluentes en E. Ríos se permiten hasta 45°, y UPM llegará a los 37°](#). “Las mejoras solicitadas por el Presidente uruguayo a UPM son innecesarias y no mejorarán ni empeorarán la salud del río Uruguay”, sostiene el catedrático uruguayo de la Universidad de la República, Dr. Oscar Ventura, en una nota pública en el sitio La Fraybentina.

2013/10/04 -- (Poder Ciudadano, VTV, Montevideo, Uruguay, con Juan Miguel Capito y Miguel Romano) UPM – [Tercera parte: ¿Cuánto contamina el Parque Industrial de Gualaguaychú?](#) Tercer bloque del programa del viernes 4 de octubre de 2013 con el Dr. en

Química Oscar N. Ventura (Profesor Catedrático (Grado 5) Udelar – Nivel 3 SNI (Grado 5) Pedeciba).

2013/10/04 -- (Radio Sarandí, Hora de Cierre, Uruguay, con Juan Miguel Carzolio y Jaime Clara) Entrevista al Químico Oscar Ventura sobre UPM ([escuchar entrevista](#)).

2013/10/03 -- (ICNDiario, Web) [Los presuntos ambientalistas de Gualeguaychú vuelven al ataque](#). En la nota periodística se señala que "El químico Oscar Ventura, catedrático de la Facultad de Química de la Universidad de la República e investigador Grado 5, que sigue de cerca los temas relacionados a la contaminación ambiental asegura que sólo el 5% de las empresas industriales de Entre Ríos (Argentina) tienen los permisos necesarios.

2013/05/31 – (Brecha, por Aníbal Corti) [El valor de la investigación fundamental está sobre todo en la gente que se forma](#). La gran importancia de la creación de conocimientos para el desarrollo del país se ha vuelto un lugar común en la política uruguaya. Sin embargo, como ocurre con aquellos fieles que olvidan durante la semana los altos valores morales que profesan los domingos, los políticos uruguayos rara vez se muestran interesados por lo que ocurre en el mundo de la investigación...

PARTICIPACIÓN EN PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN

(los proyectos en los que participé anteriores al N°19 fueron ya reportados en el informe del período anterior)

- 19) "Biosíntesis y degradación de lignina. Obtención de sustancias químicas útiles a partir de biomasa" Patricia Saenz-Méndez (responsable, Oscar N. Ventura (integrante del equipo), 2008-actual. Financiamiento Pedeciba.
- 20) "*Estudio del movimiento del lazo flexible WPD de la proteína tirosina fosfatasa humana PTP1B y los factores que lo influyen*" Aline Katz (responsable), Oscar N. Ventura (supervisor), 2010-2012, Financiamiento ANII.
- 21) "*Nanotransductores en procesos celulares de señales redox efectuados por especies reactivas de oxígeno.*" Oscar N. Ventura (responsable), 2011-2014, Financiamiento CSIC, UdelaR (\$1.999.999).
- 22) "Estudio teórico de la resistencia a la insulina en la diabetes tipo II" Oscar N. Ventura (responsable Uy), Oscar Olvera Neira (responsable Mx), 2013-actual. Financiación Proyectos Fondos Conjuntos de Cooperación Uruguay-México.
- 23) "Lignin Biosynthesis and degradation", Patricia Saenz-Méndez (responsable), Oscar N. Ventura (integrante del equipo), 2007-actual. Financiamiento Örebro University, Örebro, Suecia.
- 24) "Motivos recurrentes en productos bioactivos: síntesis, predicción del perfil de actividad biológica e identificación basada en el ligando de nuevos compuestos con actividad biológica definida.", Patricia Saenz-Méndez (responsable), Oscar N. Ventura (participante en el equipo). Financiamiento Proyectos CSIC I+D, UdelaR.
- 25) "Estudio del movimiento del lazo flexible WPD de la proteína tirosina fosfatasa humana PTP1B y los factores que lo influyen", Aline Katz (responsable), Oscar N. Ventura (supervisor). Financiamiento FCE Modalidad III; Proyecto de Tesis, ANII.
- 26) "Estudio teórico-experimental de la degradación troposférica de compuestos orgánicos volátiles halogenados y azufrados", Oscar N. Ventura (responsable), Marc E. Segovia, Kenneth Irving (investigadores nacionales), Mariano Teruel (investigador argentino). Financiamiento CSIC I+D 2015-2017.

Indicadores de producción

PRODUCCIÓN BIBLIOGRÁFICA	116
Artículos publicados en revistas científicas	109
Completo	106
Resumen	3
Trabajos en eventos	2
Libros y Capítulos	5
Capítulos de libro publicado	5
PRODUCCIÓN TÉCNICA	8
Trabajos técnicos	2
Otros tipos	6
EVALUACIONES	10
Evaluación de publicaciones	9

Jurado de tesis	1
FORMACIÓN RRHH	16
Tutorías/Orientaciones/Supervisiones concluidas	13
Tesis de maestría	7
Tesis de doctorado	5
Tesis/Monografía de grado	1
Tutorías/Orientaciones/Supervisiones en marcha	3
Tesis de doctorado	1
Orientación de posdoctorado	1
Tesis/Monografía de grado	1