



OSCAR NÉSTOR VENTURA  
PÉREZ

Dr.

[oscar.n.ventura@gmail.com](mailto:oscar.n.ventura@gmail.com)  
<https://sites.google.com/view/ccbggroup/inicio>

CCBG, DETEMA, Facultad de Química, UdeLaR, Isidoro de María 1614, CC1157, 11800 Montevideo, Uruguay  
+59899501368

### SNI

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

Fecha de publicación: 29/10/2020  
Última actualización: 28/09/2020

## 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 / CCBG-DETEMA

Dirección: CCBG DETEMA / Isidoro de María 1610 / cc 1157 / 11800 / Montevideo, Montevideo, Uruguay

Teléfono: (598) 29248396

Correo electrónico/Sitio Web: [onv@fq.edu.uy](mailto:onv@fq.edu.uy) <http://ccbg.fq.edu.uy>

## Formación

### Formación académica

#### CONCLUIDA

#### DOCTORADO

##### Doctorado en Química (1983 - 1987)

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

Título de la disertación/tesis/defensa: 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

Palabras Clave: Química computacional Enlaces de Hidrógeno Complejos moleculares Químico-Física

Áreas de conocimiento:

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

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

#### MAESTRÍA

##### Magister en Química (1981 - 1982)

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

Título de la disertación/tesis/defensa: 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/defensa:

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 Autónoma de Barcelona, España

Áreas 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 Investigaciones Físicoquímicas Teóricas y Aplicadas, Argentina

10 horas

Áreas 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 Investigaciones Físicoquímicas Teóricas y Aplicadas, Argentina

10 horas

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

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

10 horas

Áreas 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**

## Actuación profesional

### 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 aldehidos 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 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 previsiones 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 H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> 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 H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>. 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 mimiten la acción de la Gpx. e) Investigaciones sobre complejos metálicos de Cys, HCys y Sec, para entender el efecto catalítico de los iones Zn<sup>+2</sup> y Cu<sup>+2</sup> 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 H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>) para entender su inactivación reversible e irreversible, en particular en sus reacciones con H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>, 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 CF<sub>3</sub>O: 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 Autonoma de Girona - U.A.G. (Cooperación); Universidad de Poznan - UP (Cooperación); Universidad de Wroclaw - 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 Autonoma 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); Universidad de São Paulo - USP; Universidad de Wroclaw - 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 Autónoma de Barcelona - U.A.B. (Cooperación); Universität 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 /

## **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 - 01/2004 )**

Consejo de la Facultad  
Participación en consejos y comisiones

**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 - 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: 10 horas  
Carga horaria de investigación: 25 horas  
Carga horaria de formación RRHH: 8 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, reacciones de enolización y aldólicas o dehalogenación; (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 sulfinio, 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 laldosa reductasa, epóxido hidrolasa y dehalogenasas, 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 peroxidadas, 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 ClO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>, 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. Hasta Setiembre 2020, he producido más de 130 artículos científicos y he hecho más de 150 comunicaciones a congresos, conferencias invitadas y minicursillos, en unos 30 países de las Américas, Europa y África. Al presente se mantiene colaboración con científicos de Argentina, México, USA, Francia, Italia, Alemania y Grecia. Al presente se encuentra en desarrollo un macroproyecto para convertir el CCBG en un centro de referencia en estudios termoquímicos y cinéticos de reacciones atmosféricas con grupos experimentales y teóricos de Argentins, Italia, Francia y Grecia.

## Producción bibliográfica

### ARTÍCULOS PUBLICADOS

#### ARBITRADOS

##### **H-Abstraction from Dimethyl Sulfide in the Presence of an Excess of Hydroxyl Radicals. A Quantum Chemical Evaluation of Thermochemical and Kinetic Parameters Unveils an Alternative Pathway to Dimethyl Sulfoxide (Completo, 2020)**

SALTA, Z. , LUPI, J. , BARONE, V. , VENTURA, O.N.

ACS Earth and Space Chemistry, v.: 4 3 , p.:403 - 419, 2020

Palabras clave: dms dmsO H-abstraction atmospheric chemistry multigeneration OH-oxidation computational study

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: 24723452

DOI: <https://doi.org/10.1021/acsearthspacechem.9b00306>

<https://pubs.acs.org/toc/aescq/4/3>

Elucidation of the oxidation mechanism of naturally emitted reduced sulfur compounds, especially dimethyl sulfide, plays a central role in understanding background acid precipitation in the natural environment. Most frequently, theoretical studies of the addition and H-elimination reactions of dimethyl sulfide with hydroxyl radicals are studied considering the presence of oxygen that further reacts with the radicals formed in the initial steps. Although the reaction of intermediate species with additional hydroxyl radicals has been considered as part of the global mechanism of oxidation, little if any attention has been dedicated to the possibility of reactions of the initial radicals with a second ?OH molecule. In this work, we performed a computational study using quantum-chemical

methods, of the mechanism of H-abstraction from dimethyl sulfide under normal atmospheric conditions and in reaction chambers at different O<sub>2</sub> partial pressure, including complete absence of oxygen. Additionally, important rate coefficients were computed using canonical and variational transition state theory. The rate coefficient for abstraction affords a  $4.72 \times 10^{12} \text{ cm}^3 \text{ molecule}^{-1} \text{ s}^{-1}$  value, very close to the most recent experimental one ( $4.13 \times 10^{12} \text{ cm}^3 \text{ molecule}^{-1} \text{ s}^{-1}$ ). According to our best results, the initial methyl thiomethyl radical was obtained at  $\Delta 25.2 \text{ kcal/mol}$  (experimentally  $\Delta 22.4 \text{ kcal/mol}$ ), and four important paths were identified on the potential energy surface. From the interplay of thermochemical and kinetic arguments, it was possible to demonstrate that the preferred product of the reaction of dimethyl sulfide with two hydroxyl radicals is actually dimethyl sulfoxide.

Scopus

#### **Kinetics and thermodynamics of the hydroxylation products in the photodegradation of the herbicide Metolachlor (Completo, 2020)**

VENTURA, O.N.

Pure and Applied Chemistry, v.: 92 3 , p.:473 - 484, 2020

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 00334545

DOI: <https://doi.org/10.1515/pac-2018-1205>

<https://www.degruyter.com/view/journals/pac/pac-overview.xml>

Scopus

#### **Calculation of the Geometries and Infrared Spectra of the Stacked Cofactor Flavin Adenine Dinucleotide (FAD) as the Prerequisite for Studies of Light-Triggered Proton and Electron Transfer (Completo, 2020)**

KIENINGER, M., VENTURA, O.N., KOTTKE, T.

Biomolecules, v.: 10 4 , p.:573 2020

Palabras clave: stacked flavin adenine dinucleotide (FAD) in microsolvation vibrational spectra supramolecular orbitals

Areas de conocimiento:

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

Electroquímica / Bioquímica Teórica y Computacional

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 22182218

DOI: <https://doi.org/10.3390/biom10040573>

<https://www.mdpi.com/journal/biomolecules>

Flavin cofactors, like flavin adenine dinucleotide (FAD), are important electron shuttles in living systems. They catalyze a wide range of one- or two-electron redox reactions. Experimental investigations include UV-vis as well as infrared spectroscopy. FAD in aqueous solution exhibits a significantly shorter excited state lifetime than its analog, the flavin mononucleotide. This finding is explained by the presence of a "stacked" FAD conformation, in which isoalloxazine and adenine moieties form a  $\pi$ -complex. Stacking of the isoalloxazine and adenine rings should have an influence on the frequency of the vibrational modes. Density functional theory (DFT) studies of the closed form of FAD in microsolvation (explicit water) were used to reproduce the experimental infrared spectra, substantiating the prevalence of the stacked geometry of FAD in aqueous surroundings. It could be shown that the existence of the closed structure in FAD can be narrowed down to the presence of only a single water molecule between the third hydroxyl group (of the ribityl chain) and the N7 in the adenine ring of FAD.

#### **Reinvestigation of the Deceptively Simple Reaction of Toluene with OH and the Fate of the Benzyl Radical: The "Hidden" Routes to Cresols and Benzaldehyde (Completo, 2020)**

SALTA, Z., KOSMAS, AM, SEGOVIA, M. E., KIENINGER, M., TASINATO, N., VENTURA, O.N., BARONE, V.

The journal of physical chemistry. A, Molecules, spectroscopy, kinetics, environment & general theory (E), v.: 124 28 , p.:5917 - 5930, 2020

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: 15205215

DOI: <https://doi.org/10.1021/acs.jpca.0c03727>

<https://pubs.acs.org/toc/jpcafh/124/28>

In a previous work, we have investigated the initial steps of the reaction of toluene with the

hydroxyl radical using several quantum chemical approaches including density functional and composite post-Hartree-Fock models. Comparison of H-abstraction from the methyl group and additions at different positions of the phenyl ring showed that the former reaction channel is favored at room temperature. This conclusion appears at first sight incompatible with the experimental observation of a lower abundance of the product obtained from abstraction (benzaldehyde) with respect to those originating from addition (cresols). Further reactions of the intermediate radicals with oxygen, water, and additional OH radicals are explored in this paper through theoretical calculations on more than 120 species on the corresponding potential energy surface. The study of the addition reactions, to obtain the cresols through hydroxy methylcyclohexadienyl intermediate radicals, showed that only in the case of o-cresol the reaction proceeds by addition of O<sub>2</sub> to the ring, internal H-transfer, and hydroperoxyl abstraction and not through direct H-abstraction. For both p- and m-cresol, instead, the reaction occurs through a higher-energy direct H-abstraction, thus explaining in part the observed larger concentration of the ortho isomer in the final products. It was also found that the benzyl radical, formed by H-abstraction from the methyl group, is able to react further if additional OH is present. Two reaction paths leading to o-cresol, two leading to p-cresol, and one leading to m-cresol were determined. Moreover, in this situation, the benzyl radical is predicted to produce benzyl alcohol, as was found in some experiments. The commonly accepted route to benzaldehyde was found to be not the energetically favored one. Instead, a route leading to the benzoyl radical (and ultimately to benzoic acid) with the participation of one water molecule was clearly more favorable, both thermodynamically and kinetically.

Scopus<sup>\*</sup>

**A reinvestigation of the deceptively simple reaction of toluene with OH, and the fate of the benzyl radical: a combined thermodynamic and kinetic study on the competition between OH-addition and H-abstraction reactions (Completo, 2020)**

SALTA, Z. , KOSMAS, A. M. , SEGOVIA, M. E. , KIENINGER, M. , VENTURA, O.N. , BARONE, V.  
Theoretical Chemistry accounts (Print), v.: 139 p.:112 2020

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 1432881X

DOI: <https://doi.org/10.1007/s00214-020-02626-8>

<https://www.springer.com/journal/214>

Scopus<sup>\*</sup>

**From science-fiction to present life: Comment on" A never-ending story in the sky: The secrets of chemical evolution" by C. Puzzarini and V. Barone. (Completo, 2020)**

VENTURA, O.N.

Physics of Life Reviews, v.: 32 p.:121 - 123, 2020

Medio de divulgación: Papel

Escrito por invitación

ISSN: 15710645

DOI: [10.1016/j.plrev.2019.09.006](https://doi.org/10.1016/j.plrev.2019.09.006)

<https://europepmc.org/article/med/31582287>

Scopus<sup>\*</sup>

**Unraveling the role of additional OH-radicals in the H-abstraction from Dimethyl sulfide using quantum chemical computations (Completo, 2020)**

SALTA, Z , LUPI, J , TASINATO, N , BARONE, V. , VENTURA, O.N.

Chemical Physics Letters, v.: 739 p.:13696 2020

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: 00092614

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.cplett.2019.136963>

<https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0009261419309443>

Dimethyl sulfide (DMS) is the main organosulfur compound in the atmosphere. Oxidation by OH radicals to form the methyl thiomethyl species (MTMr) has been studied under normal atmospheric conditions and in reaction chambers at different O<sub>2</sub> partial pressure, including complete absence of oxygen. Scarce attention has been devoted however to the possibility of further reaction of OH with MTMr. We present here a computational study using DFT, CCSD(T) and composite methods, on the properties of two stable intermediates never fully investigated before, methanesulfenyl methanol (MSMOH) and S-methyl-methanesulfenic acid (SMMSA), arising from addition of a second OH radical to MTMr.

**Diffusion and reptation quantum Monte Carlo study of the NaK molecule (Completo, 2019)**

MARC SEGOVIA, VENTURA, O.N.

Molecular Physics, v.: 117 6, p.:813 - 822, 2019

Palabras clave: Quantum monte carlo dipole moment dissociation energy NaK

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: 00268976

DOI: <https://doi.org/10.1080/00268976.2018.1543900><https://www.tandfonline.com/doi/abs/10.1080/00268976.2018.1543900>

Diffusion Monte Carlo (DMC) and Reptation Monte Carlo (RMC) methods, have been applied to study some properties of the NaK molecule. Hartree-Fock (HF), Density Functional (DFT) and single and double configuration interaction (SDCI) wavefunctions with a valence quadruple zeta atomic natural orbital (VQZ/ANO) basis set were used as trial wavefunctions. Values for the potential energy curve, dissociation energy and dipole moment were calculated for all methods and compared with experimental results and previous theoretical derivations. Quantum Monte Carlo (QMC) calculations were shown to be useful methods to recover correlation in NaK, essential to obtain a reasonable description of the molecule. The equilibrium distance yield a value close to the experimental one. The dissociation energy, however, is not so good, and the minimum error is about 4% of the experimental value, except when a coupled-clusters method is used. In this case, a conventional CCSD(T) calculation with an extended aug-cc-pc-4 basis set gives a much better agreement to experiment. However, neither the CCSD(T) nor other MO and DFT methods are able to reproduce correctly the large dipole moment of this molecule. Even DMC methods with a simple HF trial wavefunction are able to give a better agreement to experiment, although they have a larger error bar.

Scopus WEB OF SCIENCE\*

**Tropospheric degradation of propanethiol initiated by Cl radicals: kinetics, mechanism and computational studies (Completo, 2019)**

Alejandro L. Cardona, María Belén Blanco, VENTURA, O.N., Mariano A. Teruel

Chemical Physics Letters, v.: 723 p.:69 - 75, 2019

Palabras clave: kinetics mechanisms radicals chlorine thiols

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: 00092614

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.cplett.2019.03.032><https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0009261419302118>

The rate coefficient for the reaction of Cl radicals with n-propanethiol has been determined at 298 K and atmospheric pressure to be:  $(2.37 \pm 0.66) \times 10^{-10} \text{ cm}^3 \text{ molecule}^{-1} \text{ s}^{-1}$ . Dipropyl disulfide, sulfur dioxide, and propionaldehyde, were observed as main reaction products. The yield of formation of dipropyl disulfide was quantified. Potential energy surfaces and thermodynamic data at 298 K were calculated for the gauche and trans conformers of n-propanethiol using the CBS-QB3, M06-D3/cc-pVTZ and M06-2X/cc-pVTZ levels of theory. We concluded that the formation of the prereactive complex in which chlorine is bound to the sulfur atom is the decisive step in the reaction paths.

Scopus WEB OF SCIENCE\*

**Computational Evidence Suggests That 1-Chloroethanol May Be an Intermediate in the Thermal Decomposition of 2-Chloroethanol into Acetaldehyde and HCl (Completo, 2019)** Trabajo relevante

Zoi Salta, Agnie M. Kosmas, VENTURA, O.N., Vincenzo Barone

Journal of Physical Chemistry A, v.: 123 10, p.:1983 - 1988, 2019

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 10895639

DOI: [10.1021/acs.jpca.8b11966](https://doi.org/10.1021/acs.jpca.8b11966)<https://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/acs.jpca.8b11966>

The dehalogenation of 2-chloroethanol (2ClEtOH) in the gas phase with and without the

participation of catalytic water molecules has been investigated using methods rooted into the density functional theory. The well-known HCl elimination leading to vinyl alcohol (VA) was compared to the alternative elimination route toward oxirane and shown to be kinetically and thermodynamically more favorable. However, the isomerization of VA to acetaldehyde in the gas phase, in the absence of water, was shown to be kinetically and thermodynamically less favorable than the recombination of VA and HCl to form the isomeric 1-chloroethanol (1ClEtOH) species. At the  $\omega$ B97X-D/cc-pVTZ level of calculation, this species is more stable than 2ClEtOH by about 6 kcal mol<sup>-1</sup> at 298 K, and the reaction barrier for VA to 1ClEtOH is 23 kcal mol<sup>-1</sup> versus 55 kcal mol<sup>-1</sup> for the direct transformation of VA to acetaldehyde. In a successive step, 1ClEtOH can decompose directly to acetaldehyde and HCl with a lower barrier (29 kcal mol<sup>-1</sup>) than that of VA to the same products (55 kcal mol<sup>-1</sup>). The calculations were repeated using a single ancillary water molecule (W) in the complexes 2ClEtOH<sub>W</sub> and 1ClEtOH<sub>W</sub>. The latter adduct is now more stable than 2ClEtOH<sub>W</sub> by about 8 kcal mol<sup>-1</sup> at 298 K, implying that the water molecule increased the already higher stability of 1ClEtOH in the gas phase. However, this catalytic water molecule lowers dramatically the barrier for the interconversion of VA to acetaldehyde (from 55 to 7 kcal mol<sup>-1</sup>). This barrier is now smaller than the one for the conversion to 1ClEtOH (which also decreases, but not so much, from 23 to 13 kcal mol<sup>-1</sup>). Thus, it is concluded that while 1ClEtOH may be a plausible intermediate in the gas phase dehalogenation of 2ClEtOH, it is unlikely that it plays a major role in water complexes (or, by inference, aqueous solution). It is also shown that neither in the gas phase nor in the cluster with one water molecule, the oxirane path is more favorable than the VA alcohol path. Additionally, a direct conversion of 2ClEtOH to 1ClEtOH through a transition state which resembles a VA molecule in a complex with a chlorine atom and a hydrogen atom on both sides of this planar species was found. This reaction path has also lower activation energy than the conversion to oxirane but not as low as the conversion to VA.

Scopus® WEB OF SCIENCE™

#### **Basis Set Effects in the Description of the Cl-O Bond in ClO and XClO/ClOX Isomers (X=?H, O, and Cl) Using DFT and CCSD(T) Methods (Completo, 2019)**

K. IRVING, Martina Kieninger, VENTURA, O.N.  
Journal of Chemistry, v.: 2019 Article ID 4057848, , 2019

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Internet

Escrito por invitación

ISSN: 20909071

DOI: <https://doi.org/10.1155/2019/4057848>

<https://www.hindawi.com/journals/jchem/2019/4057848/abs/>

The performance of a group of density functional methods of progressive complexity for the description of the ClO bond in a series of chlorine oxides was investigated. The simplest ClO radical species and the two isomeric structures XClO/ClOX for each X=?H, Cl, and O were studied using the PW91, TPSS, B3LYP, PBE0, M06, M06-2X, BMK, and B2PLYP functionals. Geometry optimizations and reaction enthalpies and enthalpies of formation for each species were calculated using Pople basis sets and the (aug)-cc-pVnZ Dunning sets, with n=?D, T, Q, 5, and 6. For the calculation of enthalpies of formation, atomization and isodesmic reactions were employed. Both the precision of the methods with respect to the increase of the basis sets, as well as their accuracy, were gauged by comparing the results with the more accurate CCSD(T) calculations, performed using the same basis sets as for the DFT methods. The results obtained employing composite chemical methods (G4, CBS-QB3, and W1BD) were also used for the comparisons, as well as the experimental results when they are available. The results obtained show that error compensation is the key for successful description of molecular properties (geometries and energies) by carefully selecting the method and basis sets. In general, expansion of the one-electron basis set to the limit of completeness does not improve results at the DFT level, but just the opposite. The enthalpies of formation calculated at the CCSD(T)/aug-cc-pV6Z for the species considered are generally in agreement with experimental determinations and the most accurate theoretical values. Different sources of error in the calculations are discussed in detail.

Scopus®

#### **Theoretical study of the microhydration of 1?chloro and 2?chloro ethanol as a clue for their relative propensity toward dehalogenation (Completo, 2019)**

George Petsis, Zoi Salta, Agnie M. Kosmas, VENTURA, O.N.  
International Journal of Quantum Chemistry, 2019

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: 00207608

DOI: <https://doi.org/10.1002/qua.25931>

<https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/qua.25931>

This work reports a computational analysis of hydrogen-bonded clusters of mono-, di-, tri-, and tetrahydrates of the chlorohydrins CH<sub>3</sub>CHClOH (1ClEtOH) and CH<sub>2</sub>ClCH<sub>2</sub>OH (2ClEtOH). The goal of the study is to assess the role of the water solvent into the facilitation of the initial step for dehalogenation of these compounds, a process of interest in several contexts. Molecular orbital methods (MP2), density functional methods (B3LYP, M06, and B97X-D), and composite model chemistries (CBS-QB3, G4) were employed to investigate the structure, electronic distribution, and hydrogen-bonded structure of seven monohydrates, six dihydrates, five trihydrates, and five tetrahydrates of both species. Standard reaction enthalpy and standard Gibbs free reaction energy (urn:x-wiley:00207608:media:qua25931:qua25931-math-0001) were computed for all aggregates with respect to n independent water molecules and with respect to the dimer, trimer, and tetramer of water, respectively, in order to evaluate stability and hydrogen bonding network. The influence of the water chains on the length and vibrational frequencies, especially of the C-Cl and O-H bonds, was evaluated. Hydrogen bonding in the complexes is discussed at length.

Scopus® WEB OF SCIENCE™

### **Theoretical study of the microhydration of 1-chloro and 2-chloro ethanol as a clue for their relative propensity toward dehalogenation (Completo, 2019)**

PETSI, G., SALTA, Z., KOSMAS, A. M., VENTURA, O. N.

International Journal of Quantum Chemistry, v.: 119 17, p.:1 - 15, 2019

Palabras clave: 1-chloroethanol 2-chloroethanol dehalogenation microhydration thermodynamics

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: 00207608

DOI: <https://doi.org/10.1002/qua.25931>

<https://onlinelibrary.wiley.com/journal/1097461x>

This work reports a computational analysis of hydrogen-bonded clusters of mono-, di-, tri-, and tetrahydrates of the chlorohydrins CH<sub>3</sub>CHClOH (1ClEtOH) and CH<sub>2</sub>ClCH<sub>2</sub>OH (2ClEtOH). The goal of the study is to assess the role of the water solvent into the facilitation of the initial step for dehalogenation of these compounds, a process of interest in several contexts. Molecular orbital methods (MP2), density functional methods (B3LYP, M06, and B97X-D), and composite model chemistries (CBS-QB3, G4) were employed to investigate the structure, electronic distribution, and hydrogen-bonded structure of seven monohydrates, six dihydrates, five trihydrates, and five tetrahydrates of both species. Standard reaction enthalpy and standard Gibbs free reaction energy ( ) were computed for all aggregates with respect to n independent water molecules and with respect to the dimer, trimer, and tetramer of water respectively, in order to evaluate stability and hydrogen bonding network. The influence of the water chains on the length and vibrational frequencies, especially of the C-Cl and O-H bonds, was evaluated. Hydrogen bonding in the complexes is discussed at length

Scopus® WEB OF SCIENCE™

### **Enthalpies of formation of the benzyloxyl, benzylperoxyl, hydroxyphenyl radicals and related species on the potential energy surface for the reaction of toluene with the hydroxyl radical (Completo, 2019)**

VENTURA, O. N., KIENINGER, M., SALTA, Z., KOSMAS, A. M., BARONE, V.

Theoretical Chemistry Accounts (E), v.: 138 10, p.:115 2019

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

DOI: <https://doi.org/10.1007/s00214-019-2500-8>

<https://link.springer.com/article/10.1007/s00214-019-2500-8>

The reaction of toluene (T) with ·OH produces addition products as well as the benzyl radical (TR). TR can react with ·OH or O<sub>2</sub> to produce oxygenated species, for many of which there is no experimental information available. We present here theoretically determined heats of formation (HFs) of 17 such species using the non-isodesmic reactions on the potential energy surface of TR+ O<sub>2</sub> and T+ ·OH+ O<sub>2</sub>. For those species the experimental HFs of which are known, we obtained a good correlation between experimental and theoretical values at the G4 (r<sup>2</sup> = 0.999) and M06/cc-



pVQZ ( $r^2 = 0.997$ ) levels, thus showing the goodness of the methods used. Experimentally unknown HFs of other radicals (benzyloxyl, spiro [1, 2-dioxetane benzyl], hydroxyphenyl and benzoyperoxyl) and closed-shell species (salicylic alcohol, benzo [b] oxetane and p-hydroxy cyclohexa-2, 5-dienone) were later determined using those methods.

Scopus\*

### **Computational characterization of the herbicide metolachlor and its mono-hydroxylated photodegradation products (Completo, 2018)**

Zoi Salta , Agnie M. Kosmas , VENTURA, O.N.

Theoretical Chemistry accounts (Print), v.: 137 p.:151 2018

Palabras clave: herbicides metolachlor photodegradation conformational analysis hydroxylation density functional theory

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: 1432881X

DOI: <https://doi.org/10.1007/s00214-018-2353-6>

<https://link.springer.com/article/10.1007/s00214-018-2353-6>

Electronic structure calculations have been performed for the characterization of the different conformers of the herbicide metolachlor (MC), (2-chloro-N-(2-methyl-6-ethylphenyl)-N-(2-methoxy-1-methylethyl) acetamide), the radical structures obtained through the photo chemical breaking of the C-Cl bond and the most important, experimentally identified mono-hydroxylated photo-fragmentation products. Only the S-metolachlor enantiomer that shows herbicide activity was studied. The goal of the study has been twofold. The first target has been the conformational analysis of the neutral molecule and the corresponding radical. Ten different conformers were identified for the S-metolachlor enantiomer, all of them exhibiting a near perpendicular disposition of the amidyl and the phenyl planes. They were classified into two families of minima depending on the orientation of the carbonyl group (either cis or trans with respect to the phenyl ring). All the minima in the S-cis family were found to lie higher than those in the S-trans family. The free energy of isomerization between the lowest minima of each family was found to be  $\Delta G_{298}^\ddagger = 6.2$  kcal/mol, while the isomerization barrier around the amide C-N bond causing atropisomerism was calculated to be 34.9 kcal/mol (in good agreement with the experimental energy of activation,  $36.9 \pm 3$  kcal/mol) [45]. The second part of the work is devoted to the computational characterization of the most important isomeric forms of the metolachlor radical and the major photodegradation mono-hydroxylated metabolites formed through the coupling of the metolachlor radical with OH. Reaction enthalpies and free energies for the various hydroxylation pathways have been calculated. Based on their order, the relative significance of the various hydroxylation channels is justified and the preference in the phenyl ring hydroxylation is established. The lowest exothermicity value determined,  $-5.8$  kcal/mol at the M06/6-31++G(d,p) level, corresponds to phenyl group hydroxylation at the p-position with regard to C-N bond, in excellent agreement with the experimental findings.

Scopus\* WEB OF SCIENCE\*

### **Theoretical study of the reactions of the hydroselenyl radical (HS·) with the selenenic radical (HSeO·) (Completo, 2018)**

VENTURA, O.N., VEGA-TEIJIDO, M. A., KIENINGER, M.

Journal of Molecular Modeling, v.: 24 p.:3 2018

Palabras clave: selenium radicals sulfur radicals Ahlrichs M06

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 09485023

DOI: <https://doi.org/10.1007/s00894-017-3535-1>

<https://link.springer.com/journal/894>

The formation of selenium species in some biological processes involves the generation of ionic and radical intermediates such as  $RSe^\cdot$ ,  $RSe^\cdot$ ,  $RSeO^\cdot$ , and  $RSeO^\cdot$ , among others. We performed a theoretical study of the possible mechanisms for the reaction of the two simplest Se radicals—the hydroselenyl ( $HSe^\cdot$ ) and selenenic ( $HSeO^\cdot$ ) radicals, in which the possible products, intermediates, and transition-state structures were investigated. Density functional theory (DFT) was applied at the B3LYP/6-311++G(3df,3pd) level and the Ahlrichs Coulomb fitting basis sets were employed with an effective core potential (ECP) for both Se atoms. The same procedure was used to calculate the electronic density. All calculations were also performed using the M06-2X functional, which



describes weaker bonds better than B3LYP does. In the reaction of interest, the so-called CR complex (HSe...SeOH) is formed initially. After passing through the transition state TS1, cis-HSeSeOH is obtained as a product. If a low barrier is then overcome (passing through the transition state TS32), the trans-HSeSeOH species is obtained. The CR complex can also rearrange into the intermediate INT after overcoming the barrier presented by the transition state TS2. Additionally, the decomposition of INT to H<sub>2</sub>O and 1Se<sub>2</sub> is possible through another transition state. This reaction is not included in this study. We also observed a second possible route for the conversion of INT to one of the HSeSeOH species; this route occurs through two pathways (with transition states TS31 and TS32). A comparison of some of the results with those obtained for sulfur analogs along the same pathways is also presented in this work.

Scopus® WEB OF SCIENCE™

#### **Structural insights into human microsomal epoxide hydrolase by combined homology modeling, molecular dynamics simulations, and molecular docking calculations (Completo, 2017)**

VENTURA, O.N., SAENZ-MÉNDEZ, P., KATZ, A., PÉREZ-KEMPERER, M. L., VAZQUEZ, M. Proteins: Structure, Function and Genetics (E), v.: 85 4, p.:720 - 730, 2017

Palabras clave: human microsomal epoxide hydrolase epoxide hydrolase computational chemistry molecular docking homology modeling molecular dynamics

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 10970134

DOI: <https://doi.org/10.1002/prot.25251>

<https://onlinelibrary.wiley.com/journal/10970134>

A new homology model of human microsomal epoxide hydrolase was derived based on multiple templates. The model obtained was fully evaluated, including MD simulations and ensemble-based docking, showing that the quality of the structure is better than that of only previously known model. Particularly, a catalytic triad was clearly identified, in agreement with the experimental information available. Analysis of intermediates in the enzymatic mechanism led to the identification of key residues for substrate binding, stereoselectivity, and intermediate stabilization during the reaction. In particular, we have confirmed the role of the oxyanion hole and the conserved motif (HGXP) in epoxide hydrolases, in excellent agreement with known experimental and computational data on similar systems. The model obtained is the first one that fully agrees with all the experimental observations on the system.

Scopus®

#### **Using density functional theory to increase the accuracy of experimental crystal structures: The case of potassium peroxocarbonate (Completo, 2017)**

FACCIO, R., SAENZ-MÉNDEZ, P., KIENINGER, M., VENTURA

Journal of Molecular Structure, v.: 1146 p.:1 - 4, 2017

Palabras clave: Potassium peroxocarbonate Density functional theory Crystal structure optimization

Areas de conocimiento:

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

ISSN: 00222860

DOI: [10.1016/j.molstruc.2017.05.115](https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2017.05.115)

[https://www.scopus.com/inward/record.url?eid=2-s2.0-](https://www.scopus.com/inward/record.url?eid=2-s2.0-85019665660&partnerID=40&md5=ef2c6f2b0bc463490d8)

[85019665660&partnerID=40&md5=ef2c6f2b0bc463490d8](https://www.scopus.com/inward/record.url?eid=2-s2.0-85019665660&partnerID=40&md5=ef2c6f2b0bc463490d8)

A first principles simulation of the crystal structure of potassium peroxocarbonate is presented, using density functional methods (both local and semilocal) for the calculations. An experimental crystal structure with a seemingly inconsistent disposition of the peroxide bonds was used as initial input. Both geometry optimizations of the molecular structure and optimization of the cell size were performed. While cell parameters and heavier atom positions determined at the GGA level are very close to the experimental ones, there are important discrepancies in the positioning of the hydrogen atoms. As a result of these calculations, it was shown that the assignment of the peroxydic hydrogens and the peroxydic bond in the experimental structure was incorrect. A more accurate structure is presented and geometrical as well as cell parameters described. It is also shown that LDA is not accurate enough to describe this type of ionic crystals, because of overbinding of the ions, leading to incorrect cell parameters and volume. Our methodology was validated using DFT methods with several basis sets.

Scopus® WEB OF SCIENCE™

**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  $(2.05 \pm 0.30) \times 10^{-11}$  cm<sup>3</sup> 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 O<sub>2</sub>, 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 Baeyer-Villiger 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: <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, Alzheimers 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.

Scopus

### **Density functional and chemical model study of the competition between methyl and hydrogen scission of propane and $\beta$ -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  $\beta$ -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)** Trabajo relevante

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

### **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 H<sub>2</sub>S, CH<sub>3</sub>SH, CH<sub>3</sub>CH<sub>2</sub>SH, and CH<sub>2</sub>[DOUBLE BOND]CHCH<sub>2</sub>SH, 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

Scopus® WEB OF SCIENCE™

### **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™

### **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

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.

Scopus\*

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

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 BC<sub>4</sub> 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.

Scopus\*

**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™

**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

Scopus\* WEB OF SCIENCE™

**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

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

**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

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

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

**Conformational analysis of trans-[ReO<sub>2</sub>(pn)<sub>2</sub>]<sup>+</sup> 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

Areas 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>

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

**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

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

**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

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

**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

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

**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

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

**Adsorption of 2-thiobarbituric 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

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

**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

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

**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/?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 ( $\leq 2$ ) 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.

Scopus<sup>®</sup> WEB OF SCIENCE™

**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

Scopus<sup>®</sup> WEB OF SCIENCE™

**ReO<sub>2</sub><sup>+</sup> 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

Scopus<sup>®</sup> WEB OF SCIENCE™

**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

Scopus<sup>®</sup> WEB OF SCIENCE™

**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

Scopus<sup>®</sup> WEB OF SCIENCE™

**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

Scopus<sup>®</sup> WEB OF SCIENCE™

**Ab Initio and Density Functional Study of Thionitroso XNS and Thiazyl Isomers XS<sub>N</sub>, X = H, F, Cl, Br, OH, SH, NH<sub>2</sub>, CH<sub>3</sub>, CF<sub>3</sub>, and SiF<sub>3</sub> (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

Scopus<sup>®</sup> WEB OF SCIENCE™

**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

Scopus<sup>®</sup> WEB OF SCIENCE™

**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  
[Scopus](#) [WEB OF SCIENCE](#)

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

VEGA-TEIJIDO, 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  
[Scopus](#) [WEB OF SCIENCE](#)

**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  
[Scopus](#) [WEB OF SCIENCE](#)

**Complete basis set and density functional determination of the enthalpy of formation of the controversial HO<sub>3</sub> 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  
[Scopus](#) [WEB OF SCIENCE](#)

**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  
[Scopus](#) [WEB OF SCIENCE](#)

**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  
[Scopus](#) [WEB OF SCIENCE](#)

**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  
[Scopus](#) [WEB OF SCIENCE](#)

**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  
[Scopus](#) [WEB OF SCIENCE](#)

**Complete basis set and density functional determination of the enthalpy of formation of the controversial HO<sub>3</sub> 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

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

**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

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

**Density functional computational thermochemistry: solving the discrepancy between MO and DFT calculations on the enthalpy of formation of sulfine, CH<sub>2</sub>=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

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

**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

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

**Low-temperature magnetic properties of LuBaCuFeO<sub>5</sub>+delta and TmBaCuFeO<sub>5</sub>+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

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

**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

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

**Density functional investigation of atmospheric sulfur chemistry II. The heat of formation of the XSO<sub>2</sub> radicals X = H, CH<sub>3</sub> (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

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

**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

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

**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

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

**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

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

**Density Functional Computational Thermochemistry. Determination of the Enthalpy of Formation of Sulfine, CH<sub>2</sub>=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

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

**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

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

**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

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

**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

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

**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

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

**Synthesis, Characterization and Crystal Structure of [ReO(Me<sub>4</sub>tu)<sub>4</sub>](PF<sub>6</sub>)<sub>3</sub> (Completo, 1999)**

GAMBINO, D., KREMER, E., BARAN, E.J., MOMBRÚ, A.W., SUESCUN, L., MARIEZCURRENA, 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

Scopus® WEB OF SCIENCE™

**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

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

**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

Scopus® WEB OF SCIENCE™

**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

Scopus® WEB OF SCIENCE™

**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

Scopus® WEB OF SCIENCE™

**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

Scopus® WEB OF SCIENCE™

**An analysis of static dipole polarizabilities using density functional theory: N<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>, 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

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

**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

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

**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

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

**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

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

**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

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

**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

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

**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

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

**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

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

**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

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

**Ab initio MP2, MCSCF and MR-SDCI study on the structure of O<sub>4</sub> and comparison with the hypervalent CO<sub>3</sub> and SO<sub>3</sub> 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

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

**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

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

**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

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

**On the structure of the 3B<sub>1</sub> excited state of water (Completo, 1995)**

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

Journal of Molecular Structure Theochem, v.: 334 2-3, p.:127 - 136, 1995

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 01661280

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

**The FO<sub>2</sub> 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

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

**Ab initio study of the structure of radical cations derived from H-bonded complexes: a comparison between [H<sub>2</sub>CO.H<sub>2</sub>O]<sup>+</sup> and [H<sub>2</sub>CO.HF]<sup>+</sup> (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

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

**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

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

**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

Áreas 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

**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

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

**Ab-initio study of structure and reactivity of H<sub>2</sub>CO.H<sub>2</sub>O-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

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

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

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

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

**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

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

**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

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

**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

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

**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

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

**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  
Scopus® WEB OF SCIENCE™

**Analysis of the gas-phase addition of water to formaldehyde. A semiempirical and ab initio study of bifunctional catalysis by H<sub>2</sub>O (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  
Scopus® WEB OF SCIENCE™

**Comparative ab initio and semi-empirical study of hydrogen-bonded complexes of NH<sub>3</sub> and H<sub>2</sub>O (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  
Scopus® WEB OF SCIENCE™

**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  
Scopus® WEB OF SCIENCE™

**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

Scopus® WEB OF SCIENCE™  

**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  
Scopus® WEB OF SCIENCE™

**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  
Scopus® WEB OF SCIENCE™

**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  
Scopus® WEB OF SCIENCE™

**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

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

**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

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

**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

Áreas 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

**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

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

**Theoretical study of the addition of hydrogen halides to olefins: a comparison between (HCl)<sub>2</sub> and (HF)<sub>2</sub> 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

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

**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

Scopus<sup>®</sup> WEB OF SCIENCE<sup>™</sup> [latindex](#)

**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

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

**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

Scopus® WEB OF SCIENCE™

**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

Scopus® WEB OF SCIENCE™

**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

Scopus® WEB OF SCIENCE™

**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 Físicas 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

**Quantum-mechanical study of Methyl fluoroformate (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

Scopus® WEB OF SCIENCE™

**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

Scopus® WEB OF SCIENCE™

**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

**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](http://www.springer.com)

Dehaloperoxidase 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 H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> 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)** Trabajo relevante

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

Areas 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

Areas 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

Areas 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

## 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 protone 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)** Trabajo relevante

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://lascosasdenestor.blogspot.com>

#### **(varios) (2007)** Trabajo relevante

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://lascosasdenestor.blogspot.com>

## Otras Producciones

### CURSOS DE CORTA DURACIÓN DICTADOS

#### **Aplicación de la Química Computacional en Ciencias Ambientales (2019)**

VENTURA, O.N.

Especialización

País: Colombia

Idioma: Español

Medio divulgación: Internet

Tipo de participación: Docente

Duración: 1 semanas

Lugar: Colombia

Ciudad: Medellín

Institución Promotora/Financiadora: Universidad de Antioquia

Áreas de conocimiento:

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

Electroquímica / Química Teórica y Computacional

#### **Cinética Computacional (2019)**

VENTURA, O.N.

Perfeccionamiento

País: Italia

Idioma: Inglés

Tipo de participación: Docente

Duración: 1 semanas

Lugar: Italia

Ciudad: Pisa  
Institución Promotora/Financiadora: Scuola Superiore Normale  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,  
Electroquímica / Química Teórica y Computacional

## INFORMES DE INVESTIGACIÓN

### **Aristas 2018. Informe de resultados de tercero de educación media (2019)**

VENTURA, O.N.

País: Uruguay  
Idioma: Español  
Medio divulgación: Papel  
Web: <https://www.ineed.edu.uy/images/Aristas/Publicaciones/Aristas2018/Aristas-2018-Informe-de-resultados>  
Disponibilidad: Irrestricada  
Institución Promotora/Financiadora: INEED

### **Informe sobre el Estado de la Educación en Uruguay 2017-2018 (2018)**

VENTURA, O.N.

País: Uruguay  
Idioma: Español  
Medio divulgación: Papel  
Web: <https://www.ineed.edu.uy/images/ieeuy/2017-2018/pdf/Informe-sobre-el-estado-de-la-educacion-en-Uruguay>  
Disponibilidad: Irrestricada  
Institución Promotora/Financiadora: INEED  
Información adicional: Este reporte corresponde al análisis del estado de la educación en Uruguay que fue elaborado por el equipo técnico del INEED y en el cual la Comisión Directiva que yo integré realizó tareas de ampliación, discusión, elaboración y corrección durante el período en que yo actué, como se consigna en la página de autores <https://www.ineed.edu.uy/informe-sobre-el-estado-de-la-educacion-2017-2018>

### **Aristas 2017. Informe de resultados de tercero y sexto de educación primaria (2017)**

VENTURA, O.N.

País: Uruguay  
Idioma: Español  
Medio divulgación: Papel  
Web: <https://aristas2017.ineed.edu.uy/InformeAristas2017.pdf>  
Disponibilidad: Irrestricada  
Institución Promotora/Financiadora: INEED

### **Informe sobre el Estado de la Educación en Uruguay 2015-2016 (2016)**

VENTURA, O.N.

País: Uruguay  
Idioma: Español  
Medio divulgación: Papel  
Web: <https://www.ineed.edu.uy/images/pdf/Informe-sobre-el-estado-de-la-educacion-en-Uruguay-2015-2016.pdf>  
Disponibilidad: Irrestricada  
Institución Promotora/Financiadora: INEED  
Información adicional: Este reporte corresponde al análisis del estado de la educación en Uruguay que fue elaborado por el equipo técnico del INEED y en el cual la Comisión Directiva que yo integré realizó tareas de ampliación, discusión, elaboración y corrección durante el período en que yo actué, como se consigna en la página de autores <https://www.ineed.edu.uy/images/pdf/Informe-sobre-el-estado-de-la-educacion-en-Uruguay-2015-2016.pdf>

## ORGANIZACIÓN DE EVENTOS

### **42o Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina (2016)**

VENTURA, O.N.  
Congreso  
Sub Tipo: Organización  
Lugar: Uruguay ,Radisson MONTEVIDEO  
Idioma: Español  
Medio divulgación: Otros  
Duración: 1 semanas  
Evento itinerante: SI  
Institución Promotora/Financiadora: Undelar  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,  
Electroquímica / Química Teórica y Computacional

**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 PROYECTOS

#### COMITÉ EVALUACIÓN DE PROYECTOS

##### **CTA Ciencias Exactas FCE ( 2018 / 2018 )**

Sector Gobierno/Público / Agencia Nacional de Investigación e Innovación / Agencia Nacional de Investigación e Innovación, Uruguay  
Cantidad: De 5 a 20

##### **Comisión Asesora en Química proyecto Conicyt-BID ( 2002 / 2004 )**

Sector Gobierno/Público / Ministerio de Educación y Cultura / Consejo Nacional de Innovación, Ciencia y Tecnología (CONICYT), Uruguay  
Cantidad: De 5 a 20  
CONICYT  
? Integrante de la Comisión Asesora en Química del CONICYT para la evaluación de los proyectos de investigación sometidos al programa CONICYT-BID (1992-1994).

##### **Tribunal, Universidad de Quilmes, Argentina ( 1999 )**

Sector Extranjero/Internacional/Otros / Universidad de Quilmes, Argentina  
Cantidad: Menos de 5

? Invitado como miembro de Tribunal para contratación de Profesores en la Universidad de Quilmes, Febrero 1999.

##### **Programa Conicit BID de Venezuela ( 1998 )**

Sector Extranjero/Internacional/Otros / Consejo de Desarrollo Científico, Técnico, Humanístico y de las Artes, Venezuela  
Cantidad: Menos de 5

? Evaluador de proyectos del Programa Conicit-BID de Venezuela en el área de modelado teórico (1998).

### EVALUACIÓN INDEPENDIENTE DE PROYECTOS

##### **Fondos de Investigación de la Agencia Nacional de Promoción Científica y Técnica (ANPCyT) de la República Argentina, PICT 2019-04310 ( 2020 )**

Argentina  
Ministerio de Ciencia, Tecnología e Innovación Fondo para la Investigación Científica y Tecnológica (FONCYT) ? Argentina ?  
Cantidad: Menos de 5

La Agencia Nacional de Promoción de la Investigación, el Desarrollo Tecnológico y la Innovación de la República Argentina adjudica anualmente fondos de investigación basándose en la pertinencia y calidad de los proyectos que le son sometidos. Nos dirigimos a Ud. a fin de solicitar su colaboración como evaluador experto en el proyecto PICT-2019 que se adjunta.

##### **Fondos de Investigación de la Agencia Nacional de Promoción Científica y Técnica (ANPCyT) de la República Argentina, PICT-2018-03774 ( 2019 )**

Argentina  
Ministerio de Ciencia, Tecnología e Innovación Fondo para la Investigación Científica y Tecnológica (FONCYT) ? Argentina ? <http://www.agencia.mincyt.gob.ar/>

Cantidad: Menos de 5

La Agencia Nacional de Promoción Científica y Técnica (ANPCyT) de la República Argentina adjudica anualmente fondos de investigación basándose en la pertinencia y calidad de los proyectos que le son sometidos. Dada las limitaciones de nuestro sistema de evaluación en ciencia y técnica, el mismo necesita ocasionalmente de la colaboración de otros investigadores, fundamentalmente de países de habla hispana o portuguesa. Por los méritos de sus antecedentes esta Agencia considera de fundamental interés la posibilidad de su oficio como evaluador del proyecto adjunto, PICT-2018-03774.

#### **FONDACYT-Chile ( 1999 / 2000 )**

Chile

Cantidad: Menos de 5

### **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

### **EVALUACIÓN DE CONVOCATORIAS CONCURSABLES**

**Comisión asesora para reevaluación de méritos de G3 y G4 del programa, PEDECIBA ( 2019 / 2020 )**

Comité evaluador

Uruguay

Cantidad: De 5 a 20

PEDECIBA

Reevaluación de investigadores del programa PEDECIBA, correspondiente al año 2019, culminado en 2020.

**Llamado a aspirantes No 167/19, para la provisión efectiva de un cargo de Profesor Adjunto del Área Química Computacional ? DETEMA ( 2019 )**

Comité evaluador

Uruguay

Cantidad: Menos de 5

Facultad de Química, Udelar

Integrante de la Comisión Asesora para un concurso de Prof. Adj. (G3) del DETEMA, en el área química teórica y computacional

**Fondo Clemente Estable, Comisión Técnica Asesora ( 2018 )**

Comité evaluador

Uruguay

Cantidad: De 5 a 20

ANII

CTA de Ciencias Exactas del Fondo Clemente Estable 2018, varios proyectos evaluados.

**Cargo de Asistente G2, Laboratorio de Química Teórica y Computacional de la Facultad de Ciencias ( 2018 )**

Comité evaluador

Uruguay

Cantidad: Menos de 5

Universidad de la República, Facultad de Ciencias

Tribunal de concurso de un cargo de Asistente Gr.2 efectivo

**Becas de Posgrado Nacional en Áreas Estratégicas 2016 ( 2016 )**

Evaluación independiente

Uruguay

Cantidad: Menos de 5

ANII

Estimado Oscar Ventura: A través del presente correo, la Agencia Nacional de Investigación e Innovación (ANII), Uruguay, desea hacerle llegar una invitación para participar en la evaluación de uno de nuestros Programas, el Sistema Nacional de Becas (SNB 2016). Concretamente, lo estamos invitando a evaluar solicitudes presentadas en la convocatoria a Becas de Posgrado Nacional en Áreas Estratégicas 2016, de la cual le estamos adjuntando las Bases del llamado. A fin de llevar adelante el proceso de evaluación se designó un Comité de Evaluación y Seguimiento de Becas integrado por expertos de reconocida trayectoria a nivel nacional. Dicho Comité ha propuesto su nombre para actuar como evaluador externo en las áreas relacionadas a su labor de investigador.

**Tribunal evaluador ingresos a Pedeciba ( 2016 / 2020 )**

Comité evaluador

Uruguay

Cantidad: De 5 a 20

PEDECIBA

Integrante del Comité Evaluador de los Ingresos para Investigadores del Pedeciba

**provisión efectiva de un cargo de Profesor Agregado del Área Química Cúantica ? DETEMA (Esc. ( 2016 )**

Comité evaluador

Uruguay

Cantidad: Menos de 5

Facultad de Química, Udelar

Se llama a aspirantes para la provisión efectiva de un cargo de Profesor Agregado del Área Química Cúantica ? DETEMA (Esc. G, Grado 4, 20 hs. Sem.) , con cargo a fondos presupuestales DETEMA (llave presupuestal 1000010100).

### **Tribunal Profesor Titular de Físicoquímica (2015)**

Comité evaluador  
Uruguay  
Cantidad: Menos de 5  
Facultad de Química, Udelar  
Miembro del Tribunal de Concurso para la designación de un Profesor Titular de Físicoquímica.

### **Concurso Profesor Titular (2014)**

Comité evaluador  
Uruguay  
Cantidad: Menos de 5  
Universidad de la República  
Miembro del Tribunal de Concurso para designación de un Profesor Titular del DETEMA

### **Comisión Asesora Profesor Adjunto Química Computacional (2014)**

Comité evaluador  
Uruguay  
Cantidad: Menos de 5  
Facultad de Química, Udelar  
Comisión Asesora de méritos para designación de Profesor Adjunto interino del CCBG

## **JURADO DE TESIS**

### **Defensa Intermedia de Posgrado en Química (2020)**

Jurado de mesa de evaluación de tesis  
Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química - UDeLaR,  
Uruguay  
Nivel de formación: Doctorado  
Defensa intermedia de posgrado en Química para continuar estudios de Doctorado de Alejandra Schiavo Parodi

### **Carrera de Doctorado en Química (2018)**

Jurado de mesa de evaluación de tesis  
Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Ciencias - UDeLaR,  
Uruguay  
Nivel de formación: Doctorado  
Integrante del Tribunal de Tesis de Doctorado de Stephanie Portillo, Facultad de Ciencias, Udelar

### **Carrera de Doctorado en Química (2017)**

Jurado de mesa de evaluación de tesis  
Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Ciencias - UDeLaR,  
Uruguay  
Nivel de formación: Doctorado  
Jurado de Tesis de Doctorado del Estudiante Jenner Bonanata, Julio 2017, Facultad de Ciencias

### **Doctorado Facultad de Química (2011 / 2020)**

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**

#### **Estudios atmosféricos de compuestos orgánicos volátiles con azufre (2018)**

Tesis de doctorado  
Sector Extranjero/Internacional/Otros / Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Nacional de Córdoba / Instituto de Físicoquímica, Argentina  
Tipo de orientación: Asesor/Orientador

Nombre del orientado: Alejandro Ladino

Medio de divulgación: Papel

País/Idioma: Argentina, Español

Áreas de conocimiento:

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

**Atmospheric reactivity of HC≡CCH<sub>2</sub>OH (2-propyn-1-ol) toward OH radical: Experimental determination and theoretical comparison with its alkyne analogue (2016)**

Tesis de doctorado

Sector Extranjero/Internacional/Otros / Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Nacional de Córdoba / Instituto de Físicoquímica, Argentina

Tipo de orientación: Asesor/Orientador

Nombre del orientado: Rodrigo Gibilisco

País/Idioma: Argentina, Español

Áreas de conocimiento:

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

**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

**Estudio del mecanismo de acción de dehaloperoxidasas (2008)**

Tesis de doctorado

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

Tipo de orientación: Tutor único o principal

Nombre del orientado: 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

**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 (oligoinositolos y oligoconduritulos) 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 ciclitos 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 $YBa_2Cu_3-xMxO_7$ -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  $YBa_2Cu_3-xMxO_7-d$  (M = Fe, Co, Ni, Mn). Esta serie está basada en el compuesto original  $YBa_2Cu_3O_7-d$  (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  $YBa_2Cu_3-xMxO_7-d$  (M = 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 dióxido de vanadio y tecnecio (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 H<sub>2</sub>O 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 electroreducción 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**

#### **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  
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  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,  
Electroquímica / Química Teórica y Computacional

### **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  
Areas 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.

### **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 Rivela  
Medio de divulgación: Papel  
País/Idioma: Uruguay, Español  
Palabras Clave: Química atmosférica Química Teórica  
Areas 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.

#### **Entalpías de formación de clorobenzenos y clorodibenzofuranos (2005)**

Orientación de posdoctorado  
Sector Extranjero/Internacional/Otros / Instituto de Investigaciones Fisicoquímicas Teóricas y Aplicadas, Argentina  
Tipo de orientación: Tutor único o principal  
Nombre del orientado: María Paula Badenes  
País/Idioma: Argentina, Español



### **Estudios DFT de Nucleasas Químicas. (1996)**

Orientación de posdoctorado

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

Tipo de orientación: Tutor único o principal

Nombre del orientado: Martina Kieninger

País/Idioma: Uruguay, Inglés

## **Otros datos relevantes**

### **PREMIOS, HONORES Y TÍTULOS**

#### **Investigador Principal G5 (Reevaluación y renovación) (2019)**

(Nacional)

Pedeciba

#### **Beca Alexander von Humboldt (2019)**

(Internacional)

Alexander von Humboldt-Stiftung

Beca para estudios de química atmosférica en Jülich, Alemania con el Prof. Luc Vereecken

#### **Profesor Titular Efectivo (G5) de la Facultad de Química (Reevaluación y Renovación) (2019)**

(Nacional)

Universidad de la República

Reevaluación y renovación en el cargo de Profesor Titular Efectivo (G5), Dedicación Total, Facultad de Química, Udelar

#### **Investigador Principal SNI (GIII) (2019)**

(Nacional)

ANII

#### **Renovación Dedicación Total (2015)**

(Nacional)

Universidad de la República

#### **Investigador Principal G5 (2014)**

(Nacional)

Pedeciba

Reevaluado por árbitros internacionales y confirmado como Investigador Principal, G5, del Pedeciba, 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

#### **Beca Alexander von Humboldt (renovación 2005) (2005)**

(Internacional)

Alexander von Humboldt-Stiftung

**Beca Alexander von Humboldt (renovación 2005) (2005)**

(Internacional)  
Alexander von Humboldt-Stiftung

**Beca Alexander von Humboldt (renovación 2001-2002) (2001)**

(Internacional)  
Alexander von Humboldt-Stiftung

**Premio Roberto Caldeyro Barcia (1999)**

(Nacional)  
PEDECIBA-PNUD, Uruguay

**Fondo Nacional de Investigadores 1999-2001 (1999)**

(Nacional)  
MEC, CONICYT Uruguay  
Designación como investigador G3 del Fondo Nacional de Investigadores por el período 1999-2001

**Beca de investigación Alexander von Humboldt (1994)**

(Internacional)  
Alexander von Humboldt-Stiftung  
Beca de la Fundación Alexander von Humboldt, fraccionada en 3 períodos anuales de 3 meses, en los años 1994, 1995 y 1996, para trabajar junto al Prof. Geerd Diercksen en el Max-Planck Institut für Physik und Astrophysik

**Premio Folia Chimica Theoretica Latina al mejor artículo de revisión en un tema de actualidad en Química Teórica (1992)**

(Internacional)  
Folia Chimica Theoretica Latina  
Aplicación de métodos semiempíricos derivados del MNDO a la determinación de la estructura y reactividad de complejos de enlace de hidrógeno, E.L.Coitiño y O.N.Ventura, Folia Chimica Theoretica Latina 17 (1989) 191-223.

**Mejor Científico Joven (menor de 35 años) en el área de la Química (1991)**

(Internacional)  
MEC-CONICYT, Uruguay-TWAS, Italia  
Otorgado en 1992

**Subvención CUNY (1991)**

(Internacional)  
City University of New York  
Subvención de la Research Foundation of the City University of New York para permanecer como científico invitado con el Prof.J.J.Dannenberg, Marzo-Abril 1991

**Subvención Max-Planck (1991)**

(Internacional)  
Max-Planck Institut für Physik und Astrophysik  
Subvención del Max-Planck-Institut für Astrophysik para permanecer como científico visitante, Octubre 1991

**Subvención Università degli Studi di Pisa (1991)**

(Internacional)  
Università degli Studi, Pisa, Italia  
Subvención de la Università di Pisa, como profesor visitante junto al Prof. Jacopo Tomasi, Octubre 1991.

**Beca Comunidad Económica Europea (1988)**

(Internacional)

Comunidad Económica Europea (hoy CE)

Beca de la Comunidad Económica Europea para permanecer 8 meses como científico invitado en Barcelona, España y Heidelberg, Alemania, 1988

#### **Subvención Universidad de Uppsala (1987)**

(Internacional)

Universidad de Uppsala

Beca de la Universidad de Uppsala, Suecia, para cubrir la estancia de investigación con el Prof. Osvold Goscinski, Setiembre-Octubre 1987.

#### **Beca Convenio España-Latinoamérica (1986)**

(Internacional)

Instituto de Cooperación Iberoamericana, a Convenio de cooperación España-Latinoamérica

Beca del Convenio España-Latinoamérica para gastos de viaje y dos meses de estancia en Barcelona para realizar tareas de investigación con el Prof. Joan Bertran, Feb. 1986.

#### **Beca Max-Planck (1986)**

(Internacional)

Max-Planck Institut für Physik und Astrophysik

Beca del Max-Planck-Institut für Physik und Astrophysik para permanecer tres meses como científico invitado en el Instituto realizando tareas de investigación con el Prof. Geerd Dierksen, 1986.

#### **Subvención Ministerio de Cultura, Italia (1985)**

(Internacional)

Ministerio de Cultura, gobierno de Italia

Subvención del Ministerio de Cultura del Gobierno de Italia (gastos de estancia en Pisa durante un mes para realizar trabajo de investigación con el Prof. Jacopo Tomasi), Marzo 1985.

#### **Beca Max-Planck (1984)**

(Internacional)

Max-Planck Institut für Physik und Astrophysik

Subvención del Max-Planck-Institut für Physik und Astrophysik (gastos de viaje y estancia por un mes para realizar trabajo de investigación con el Prof. Geerd Dierksen en Garching), Dic. 1984.

#### **Beca UNESCO (1982)**

(Nacional)

UNESCO, Naciones Unidas

Subvención de UNESCO para concurrir a congresos en Suecia y Dinamarca, Mayo 1982.

#### **Premio Nacional de Investigación ?20 años del CONICYT (1981)**

(Nacional)

MEC, CONICYT, Uruguay

### **PRESENTACIONES EN EVENTOS**

#### **ENAIQI6 (2019)**

Encuentro

Encuentro Nacional de Química 6, Pedeciba

Uruguay

Tipo de participación: Poster

Carga horaria: 4

Nombre de la institución promotora: Pedeciba

Palabras Clave: química atmosférica óxidos de nitrógeno métodos multiconfiguracionales

Áreas de conocimiento:

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

Electroquímica / Química Teórica y Computacional

e-Póster ?Performance de MC-PDFT para el estudio de la disociación del HOONO?, Katz, A.;

Ventura, O. N.; ?6º Encuentro Nacional de Ciencias Químicas ? ENAIQI6?, Montevideo, Uruguay,

16 al 18 de noviembre de 2019.

**ICCK2019 (2019)**

Congreso  
11th International Conference in Chemical Kinetics  
Francia  
Tipo de participación: Expositor oral  
Carga horaria: 40  
H2S+Cl benchmarking for kinetics Marc E. Segovia<sup>1</sup>, Oscar N. Ventura<sup>1\*</sup>, Jacopo Lupi<sup>2</sup>, Zoi Salta<sup>2</sup>, Nicola Tasinato<sup>2</sup> and Vincenzo Barone<sup>2</sup>

**Simposio Interdisciplinario de Física y Química (2019)**

Encuentro  
Humboldt Kolleg "Physics and Chemistry Meeting at the Interface"  
Colombia  
Tipo de participación: Conferencista invitado  
Carga horaria: 40  
Nombre de la institución promotora: Universidad de Antioquía y Fundación Alexander von Humboldt  
Palabras Clave: CCSD(T) DFT química atmosférica MRCI  
Use of single- and multi-configurational density functional theory in the study of reactions important in atmospheric chemistry Oscar N. Ventura

**11th ESPA (2018)**

Congreso  
11th Congress in Electronic Principles and Applications  
España  
Tipo de participación: Expositor oral  
Carga horaria: 40  
Palabras Clave: tolueno química atmosférica oxidación radicales OH  
Theoretical study of the initial steps in the reaction of toluene with the hydroxyl radical, O. N. Ventura, Z. Salta, M. Kieninger, M. E. Segovia, A. M. Kosmas, 11th Congress in Electronic Principles and Applications, Toledo, España, 17-19/07/2018.

**EuAsC2S15 (2018)**

Congreso  
15th Eurasia Conference on Chemical Sciences  
Italia  
Tipo de participación: Expositor oral  
Carga horaria: 40  
Palabras Clave: pesticidas metolachlor radicales análisis conformacional  
Computational characterization of the herbicide Metolachlor: structure, conformational analysis and monohydroxylated photo degradation products, Z. Salta, A. M. Kosmas, O. N. Ventura, 15th Eurasia Conference on Chemical Sciences EuAsC2S15; Rome, Italy, 5-8 September 2018

**EuAsC2S-15 (2018)**

Congreso  
15th Eurasia Conference on Chemical Sciences  
Italia  
Tipo de participación: Conferencista invitado  
Carga horaria: 40  
A reinvestigation of the deceptively simple reaction of toluene with HO<sup>?</sup>, and the fate of the benzyl radical, Z. Salta, A. M. Kosmas, M. Kieninger, O. N. Ventura, 15th Eurasia Conference on Chemical Sciences EuAsC2S-15; Rome, Italy, 5-8 September 2018

**Humboldt Colloquium (2018)**

Encuentro  
?Shaping the Future of German-Argentinian Scientific Cooperation ? The Role of Curiosity-Driven Research?  
Argentina  
Tipo de participación: Conferencista invitado  
Carga horaria: 20  
Nombre de la institución promotora: Fundación Alexander von Humboldt  
Using Computational Methods for Research in Environmental Chemistry: An Area of Opportunity, Humboldt Colloquium ?Shaping the Future of German-Argentinian Scientific Cooperation ? The

**XX Congreso Argentino de Físicoquímica y Química Inorgánica (2017)**

Congreso

Congreso Argentino de Físicoquímica y Química Inorgánica

Argentina

Tipo de participación: Poster

Carga horaria: 40

Nombre de la institución promotora: INFICQ, CONICET, Universidad Nacional de Córdoba

Palabras Clave: hidrofluoroolefinas oxidación por OH DFT Química Atmosférica

Areas de conocimiento:

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

Los Clorofluorocarbonos (CFC) y los Hidroclorofluorocarbonos (HCFC) que tienen prolongados tiempos de vida en la atmósfera, representan una de las importantes fuentes antropogénicas de cloro reactivo en la estratosfera. Estos átomos participan en ciclos catalíticos destructivos del ozono, por lo tanto, se requiere el desarrollo de alternativas ambientalmente menos perjudiciales. En este sentido, las hidrofluoroolefinas (HFO) están actualmente en estudio como compuestos reemplazantes viables de los CFC debido a que poseen alta reactividad en fase gaseosa en comparación a los Hidrofluorocarbonos (HFC) utilizados actualmente. Antes de su uso en aplicaciones comerciales, es necesario profundizar en el estudio de su química degradativa y el posible impacto sobre el medio ambiente. Debido a lo mencionado anteriormente, en este trabajo se realizó el estudio teórico de las siguientes HFOs: (1FP) 1-fluoropropeno  $\text{CH}_3\text{CH}=\text{CHF}$ , (2FP) 2-fluoropropeno  $\text{CH}_3\text{CF}=\text{CH}_2$  y (1TF2FP) 1-trifluoro-2-fluoropropeno  $\text{CF}_3\text{CF}=\text{CH}_2$  para sus reacciones con radicales OH y átomos de Cl.

**XLIII Congress of Theoretical Chemists of Latin Expression, Paris 2017 (2017)**

Congreso

Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina 2017

Francia

Tipo de participación: Poster

Carga horaria: 40

Palabras Clave: ccSD(t) azufre tioles radicales

Areas de conocimiento:

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

CCSD(T), composite ab initio and dispersion-corrected DFT studies of reactions of sulfinyl and thiyl radicals and anions Martina Kieninger, Mauricio A. Vega-Tejido

**ENQUI5 (2017)**

Encuentro

Quinto Encuentro de Química

Uruguay

Tipo de participación: Poster

Carga horaria: 10

Nombre de la institución promotora: Pedeciba

Palabras Clave: CCSD(T) M06 azufre selenio radicales

Mecanismo de reacción de los radicales hidroselenil ( $\text{HSe}\cdot$ ) y selenénico ( $\text{HSeO}\cdot$ ) Mauricio A. Vega-Tejido, Martina Kieninger, Oscar N. Ventura

**XLIII Congrès des Chimistes Théoriciens d'Expression Latine (2017)**

Congreso

Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina 2017

Francia

Tipo de participación: Conferencista invitado

Carga horaria: 40

Palabras Clave: halogens X-O bond DFT CCSD(T) Basis Sets

Effects of methods and basis sets in the description of the X-O bond in halogen oxides, O. N.

Ventura, conferencia invitada, XLIII Congrès des Chimistes Théoriciens d'Expression Latine, Paris 3-7 juillet 2017

**XX Congreso Argentino de Físicoquímica y Química Inorgánica (2017)**

Congreso

XX Congreso Argentino de Físicoquímica y Química Inorgánica  
Argentina

Tipo de participación: Conferencista invitado

Carga horaria: 40

Nombre de la institución promotora: Universidad de Córdoba

Palabras Clave: Cl-O bond óxidos de cloro

Effect of method and basis set in the description of the Cl-O bond in chlorine oxides, O. N. Ventura, K. Irving, M. Kieninger, XX Congreso Argentino de Físicoquímica y Química Inorgánica, Carlos Paz, Córdoba, Argentina, 16-19/05, 2017 (conferencista invitado).

#### **XLIII Congrès des Chimistes Théoriciens d'Expression Latine (2017)**

Congreso

XLIII Congrès des Chimistes Théoriciens d'Expression Latine

Francia

Tipo de participación: Poster

Carga horaria: 40

Palabras Clave: halogen oxides

Correlation consistent versus polarization consistent optimized basis sets in density functional calculations of halogen oxide species, O. N. Ventura, M. Kieninger, K. Irving, XLIII Congrès des Chimistes Théoriciens d'Expression Latine, Paris 3-7 juillet 2017

#### **QUITEL 2016 (2016)**

Congreso

Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina 2016

Uruguay

Tipo de participación: Poster

Carga horaria: 40

Nombre de la institución promotora: Universidad de la República

Palabras Clave: epóxidos protonación métodos de funcionales de la densidad

Determination of the best DFT method to describe protonated epoxides?, Katz, A.; Saenz-Méndez, P.; Ventura, O. N.; ?XLII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina ? QUITEL 2016?, Montevideo, Uruguay, 20 al 25 de noviembre de 2016.

#### **QUITEL 2016 (2016)**

Congreso

Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina 2016

Uruguay

Tipo de participación: Poster

Carga horaria: 40

Nombre de la institución promotora: Universidad de la República

Palabras Clave: insulina métodos de dinámica molecular

Áreas de conocimiento:

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

Microsecond molecular dynamics study of insulin?, Katz, A.; Olvera-Neria, O.; Estrada-Real, A. C.; González-Torres, J. C.; Poulain, E.; Domínguez-Soria, V. D.; Saenz-Méndez, P.; Ventura, O. N.; ?XLII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina ? QUITEL 2016?, Montevideo, Uruguay, 20 al 25 de noviembre de 2016.

#### **QUITEL2016 (2016)**

Congreso

Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina 2016

Uruguay

Tipo de participación: Poster

Carga horaria: 40

Nombre de la institución promotora: Universidad de la República

Palabras Clave: selenio radicales

Mechanistic study of the reaction of HSeO and HSe radicals Mauricio A. Vega-Tejido, Oscar N. Ventura

#### **FQAL2016 (2016)**

Congreso

Físico Química na América Latina. Da estrutura molecular a cinética química

Brasil

Tipo de participación: Conferencista invitado

Carga horaria: 40

Palabras Clave: Chlorine oxides CCSD(T) DFT

Basis set effects in the description of the Cl-O bond in ClO and XClO isomers (X=H,O,Cl) using DFT and CCSD(T) methods, K. Irving, M. Kieninger, O. N. Ventura, Fisico Quimica na America Latina. Da estrutura molecular a cinetica quimica. FQAL 2016, Juiz de Fora, Minas Gerais, Brasil, 23/2-27/2, 2016.

### **QUITEL 2016 (2016)**

Congreso

42nd International Congress of Theoretical Chemists of Latin Expression

Uruguay

Tipo de participación: Poster

Carga horaria: 40

Nombre de la institución promotora: Universidad de la República

Palabras Clave: chlorine superoxide bromine superoxide dft methods

- On the double minimum on the potential energy surface of the chlorine superoxide radical ClOO, M. Kieninger, K. Irving, O. N. Ventura, QUITEL 2016, 42nd International Congress of Theoretical Chemists of Latin Expression Montevideo, Uruguay, November 20th-25th 2016.

### **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

Areas 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] Lecaillon, 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

Areas 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

Areas 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

Areas 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

Areas 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 Lauimalide

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 Lauimalide 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 lindslog 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 (ENAQUI 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

Áreas 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

Áreas 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 ENAQUI 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

Áreas de conocimiento:

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

- Gastón País, 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 ENAQUI 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

Áreas 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

Áreas 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  
Áreas 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-Simpósio 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  
Áreas 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 CO<sub>2</sub> supercrítico  
Colombia  
Tipo de participación: Poster  
Palabras Clave: Química computacional  
Áreas 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 CO<sub>2</sub> 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  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química / Química computacional

#### **XV Simpósio Brasileiro de Química Teórica (2009)**

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 calco gênicos. In: XV Simpósio Brasileiro de Química Teórica, 2009. Poços de Caldas, MG, Brasil. Livro de Resumos do XV Simpósio Brasileiro de Química Teórica. 2009

## CONSTRUCCIÓN INSTITUCIONAL

1. Director, Instituto de Química, Facultad de Ciencias(FC), 1/1990-5/1992
2. Director del DEQUIFIM, FQ, UDELAR 11/2/2000-2/3/2003
3. Decano Interino durante ausencias del titular FQ,2002-2004
4. Claustriista, FQ,(1985-1989).
5. Claustriista Suplente, Asamblea General del Claustro,UDELAR(1985-1987).
6. Integrante de la Comisión de Cursos y Asuntos Curriculares, Carrera de Magister en Química, Consejo, FQ,1986-1987.
7. Integrante de la Comisión de Investigación Científica, Claustro, FQ, 1985-1987.
8. Integrante de la Comisión de Reestructura, Claustro, FQ, 1988-1989.
9. Primer Suplente, Orden Docente, Consejo, FQ, (hasta 1990).
10. Integrante de la Comisión Técnica de Magister en Química y Doctorado,Consejo,FQ,(hasta 1990).
11. Representante FQ,Comisión Central de la Facultad de Ciencias Exactas y Naturales (hasta 1990).
12. Segundo Suplente, Consejo,F.Ciencias,12/1990-5/1992
13. Integrante de la Comisión de Instituto,Instituto de Química,F.Ciencias,12/1990-5/1992
14. Comisión Conjunta FC/FQ ?administración de docentes con doble dependencia?.
15. Comisión Asesora para compra de equipo informático de la F.Ciencias (1991)
16. Claustriista,FQ,(1994-1995).
17. Encargado de la Cátedra de Matemática,FQ,1995-1997.
18. Consejero Docente Titular,Consejo FQ,1998-2002.
19. Claustriista,AGC,UDELAR,1998-2002.
20. Miembro Titular de la Comisión de Investigación Científica(Consejo FQ) 1998-2002.
21. Miembro Titular de la Comisión de Estructura Docente(Consejo FQ),1998-2002.
22. Miembro Titular de la Comisión Interfacultades de Ingeniería Química(FI/FQ),1998-2002.
23. Miembro titular (área Básicas/área Científico-Tecnológica) de la CSIC,hasta 2002.
24. Miembro de la Comisión de Seguimiento de la Carrera de Químico,1998-2002
25. Consejero Docente Titular (reelecto),Consejo de FQ,Período 2002-2006.
26. Miembro Comisión de Presupuesto,Consejo FQ,2002-2005
27. Miembro Comisión de Estructura Docente y Departamentalización,Cnsejo FQ,2002-2005
28. Integrante Comisión Directiva del Departamento Docente Dequifim,2002-2005
29. Integrante Comisión Directiva del Departamento Docente DETEMA,2006-
30. Participación en la creación de la Unidad Académica de Informática Química, con recursos humanos del laboratorio bajo mi dirección. El CCBG y la UAIQ tienen una estrecha relación, no sólo porque su principal referente el Lic. Kenneth Irving pertenece al CCBG sino porque toda la estructura de conexión a Internet (acceso a sitios web, correo electrónico, bedelías, contaduría, etc) se desarrolló sobre la primigenia conexión de nuestro grupo a Internet.
31. Hemos podido concretar el viejo sueño de desarrollar un cluster computacional propio construyéndolo con sucesivas adiciones a partir de recursos provenientes de diversos proyectos. El cluster comenzó a instalarse en 2008 y tuvo una primera etapa hasta 2011 en que contábamos con relativamente baja capacidad computacional. Este fenómeno fue revertido en este período y en este momento el equipo cuenta con varios servidores independientes de las marcas HP y Dell, que funcionan en paralelo gracias a una conexión de internet propia de alta velocidad. Actualmente el cluster cuenta con 22 nodos, que en conjunto suman 352 cores. El mantenimiento de este recurso durante toda la década transcurrida ha estado a cargo del CCBG
32. Miembro fundador de la iniciativa para la instalación de un centro de computación de alta dedicación (presentado por la Facultad de Ingeniería) que culminó en la instalación del Cluster.uy, el cluster más grande de Uruguay.
33. Miembro de la Comisión Directiva del Instituto Nacional de Evaluación Educativa, Abril 2016 - Junio 2019.

## Información adicional

### ESTADÍSTICAS DE PUBLICACIÓN

Total de artículos publicados en revistas con referato.....	127
Total presentes en Scholar.....	136
Citas colectadas por el artículo más citado (Scholar).....	133
Total de citas Scholar a los artículos allí presentes.....	1994
h-factor (Scholar).....	25

### 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> Durante la actual pandemia (2020) me he dedicado a divulgar en la prensa elementos sobre la evolución, modelos y tratamiento de la infección COVID-19.

#### Extensión

Adición semanal en Radio Rural (jueves 9:30 a 10:30) sobre temas científicos, educativos y políticos 2019-2020

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>), 2015-2017

#### · 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

#### · Algunas 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 -- (Semanario Voces, Montevideo, Uruguay) [Intentando desarrollar un modelo de aproximación al narcotráfico](#)

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

2013/08/01 -- (Semanario 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

[Entrevistas en 2020 relacionadas con la pandemia](#)

13/03/20 <https://www.montevideo.com.uy/Noticias/Academico-pidio-a-decano-de-la-Facultad-de-Quimica-que-suspenda-las-clases-por-coronavirus-uc746793>

19/03/20 <https://www.carve850.com.uy/2020/03/19/catedratico-de-quimica-tenemos-mucho-mas-infectados-de-lo-que-los-numeros-indican/>

24/03/20 <https://www.elobservador.com.uy/nota/por-que-esta-semana-es-clave-para->

conocer-la-evolucion-del-coronavirus-202032316100  
29/03/20 <http://ro.com.uy/2020/03/cientifico-uruguayo-comportamiento-en-semana-de-turismo-sera-clave-oscar-ventura-hace-un-analisis-detallado-de-los-casos-en-uruguay-y-realiza-un-seguimiento-con-graficas-y-proyecciones-mira-la/>  
31/03/20 <https://www.youtube.com/watch?v=1BlgPsU1Jmc>  
02/04/20 <https://www.martes.com.uy/tenemos-para-rato-con-esto>  
02/04/20 [https://soundcloud.com/radio\\_rural/sets/sin-vueltas-jueves-2-abril](https://soundcloud.com/radio_rural/sets/sin-vueltas-jueves-2-abril)  
03/04/20 <https://www.radiomontecarlo.com.uy/2020/04/03/nacionales/especialista-aseguro-que-uruguay-esta-logrando-controlar-la-expansion-del-coronavirus/>  
04/04/20 <https://www.montevideo.com.uy/Noticias/Como-es-la-evolucion-del-coronavirus-en-Uruguay-y-por-que-Turismo-es-una-semana-clave-uc749153>  
05/04/20 <https://www.prensa-latina.cu/index.php?o=rn&id=355599&SEO=complicada-semana-para-uruguay-en-combate-a-la-covid-19>  
05/04/20 <http://www.saltoinforma.com/2020/04/05/como-es-la-evolucion-del-coronavirus-en-uruguay-y-por-que-turismo-es-una-semana-clave/>  
06/04/20 <https://www.youtube.com/watch?v=ebHx8oyr09E>  
09/04/20 [https://soundcloud.com/radio\\_rural/oscar-ventura-jueves-9-abril-1](https://soundcloud.com/radio_rural/oscar-ventura-jueves-9-abril-1)  
09/04/20 <https://uy.radiocut.fm/audiocut/hoy-no-es-un-dia-cualquiera-2/>  
16/04/20 [https://soundcloud.com/radio\\_rural/oscar-ventura-jueves-16-abril](https://soundcloud.com/radio_rural/oscar-ventura-jueves-16-abril)  
17/04/20 <https://www.teledoce.com/programas/esta-boca-es-mia/a-cinco-semanas-de-la-llegada-del-coronavirus-el-cambio-de-vida-de-los-uruguayos-por-la-pandemia/>

#### Entrevistas sobre otros temas en años anteriores

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 -- (Sabido más de Ud., Radio Vamos) El programa ?Sabido 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) Maa-ilmanpolitiikan 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 -- (Semanario 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 Óscar 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 Óscar 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 Óscar 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 publica 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 Gualeguaychú?](#) 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 Óscar 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?

## Indicadores de producción

<b>PRODUCCIÓN BIBLIOGRÁFICA</b>	<b>134</b>
<b>Artículos publicados en revistas científicas</b>	127
Completo	124
Resumen	3
<b>Trabajos en eventos</b>	2
<b>Libros y Capítulos</b>	5
Capítulos de libro publicado	5
<b>PRODUCCIÓN TÉCNICA</b>	<b>15</b>
<b>Trabajos técnicos</b>	2
<b>Otros tipos</b>	13
<b>EVALUACIONES</b>	<b>30</b>
<b>Evaluación de proyectos</b>	7
<b>Evaluación de publicaciones</b>	9
<b>Evaluación de convocatorias concursables</b>	10
<b>Jurado de tesis</b>	4
<b>FORMACIÓN RRHH</b>	<b>20</b>
<b>Tutorías/Orientaciones/Supervisiones concluidas</b>	20
Tesis de maestría	7
Tesis de doctorado	8



Tesis/Monografía de grado	2
Orientación de posdoctorado	3