



**LEONARDO DARRÉ  
CASTELL**

Doctor

[lrदारre@gmail.com](mailto:lrदारre@gmail.com)

**SNI**

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas  
Categorización actual: Nivel I (Activo)

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

## Datos Generales

### INSTITUCIÓN PRINCIPAL

Institut Pasteur de Montevideo/ Institut Pasteur de Montevideo / Functional Genomic Lab / Uruguay

### DIRECCIÓN INSTITUCIONAL

Institución: Institut Pasteur de Montevideo / Institut Pasteur de Montevideo / Sector Organizaciones Privadas sin Fines de Lucro/Sociedades Científico-Tecnológicas  
Dirección: Mataojo 2020 / 11400 / Montevideo , Uruguay  
Teléfono: 092808777  
Correo electrónico/Sitio Web: [lrदारre@gmail.com](mailto:lrदारre@gmail.com)  
[https://www.researchgate.net/profile/Leonardo\\_Darre](https://www.researchgate.net/profile/Leonardo_Darre)

## Formación

### Formación académica

#### CONCLUIDA

##### DOCTORADO

###### Doctorado en Ciencias Biológicas (UDELAR-PEDECIBA) (2009 - 2012)

Universidad de la República - Facultad de Ciencias - UDeLaR , Uruguay  
Título de la disertación/tesis: Desarrollo de Métodos para Acelerar Simulaciones de Dinámica Molecular  
Tutor/es: Sergio Pantano  
Obtención del título: 2012  
Palabras Clave: Coarse Grain Solvatacion Acuosa Dinamica Molecular  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica Computacional

##### GRADO

###### Licenciatura en Bioquímica (2001 - 2008)

Universidad de la República - Facultad de Ciencias - UDeLaR , Uruguay  
Título de la disertación/tesis: Estudio de la Robustez del Ciclo Circadiano en Drosophila  
Tutor/es: Luis Acerenza  
Obtención del título: 2009  
Palabras Clave: biologia de sistemas robustez ciclo circadiano  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biología de Sistemas

#### EN MARCHA

##### MAESTRÍA

###### Maestria Bioinformatica (PEDECIBA-UdelaR) (2009)

Universidad de la República, Facultad de Ciencias - UDeLaR, Uruguay  
Título de la disertación/tesis:  
Tutor/es: Sergio Pantano  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica Computacional

### Formación complementaria

## CONCLUIDA

### POSDOCTORADOS

#### **KCL postdoctoral fellowship (2013 - 2015)**

Sector Extranjero/Internacional/Otros / Kings College London , Inglaterra  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica /

### CURSOS DE CORTA DURACIÓN

#### **Molecular Dynamics to Analyse Neutron Scattering Experiments (01/2014 - 01/2014)**

Sector Extranjero/Internacional/Otros / Institut Laue-Langevin , Francia

#### **13th Oxford School in Neutron Scattering (01/2013 - 01/2013)**

Sector Extranjero/Internacional/Enseñanza superior / University of Oxford , Inglaterra

#### **Coarse Grained Biomolecular Modeling (01/2011 - 01/2011)**

Sector Extranjero/Internacional/Enseñanza superior / Ecole Polytechnique Federale de Lausanne , Suiza  
45 horas

#### **Hands-on Course on Coarse Grain Methods for Biomolecular Simulations (01/2011 - 01/2011)**

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

#### **Coarse-grained Simulation of Biological Soft Matter Systems using ESPResSo (01/2011 - 01/2011)**

Sector Extranjero/Internacional/Otros / Universität Stuttgart , Alemania  
45 horas

#### **Estrategias bioinformático-estructurales aplicadas a la medida de energías libres de interacción (FEPs) (01/2010 - 01/2010)**

Sector Educación Superior/Público / Programa de Desarrollo de las Ciencias Básicas / Programa de Desarrollo de las Ciencias Básicas , Uruguay  
Palabras Clave: Bioinformatica Estructural Energia Libre

#### **Computational Modelling and Simulations of Biological Systems (01/2010 - 01/2010)**

Sector Organizaciones Privadas sin Fines de Lucro/Sociedades Científico-Tecnológicas / Institut Pasteur de Montevideo / Institut Pasteur de Montevideo , Uruguay  
Palabras Clave: Modelado Simulaciones

#### **I Latin American Biophysics Postgraduate Course (01/2009 - 01/2009)**

Sector Extranjero/Internacional/Otros / Sociedad Brasileira de Biofísica , Brasil  
Palabras Clave: Biofísica

#### **Eighth J.J. Giambiagi Winter School Part A: Clusters, Molecules, Biomolecules and Materials (01/2006 - 01/2006)**

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

#### **Calcium signalling, with special attention to cell motility and the cytoskeleton. (EMBO, ICRO) (01/2005 - 01/2005)**

Sector Gobierno/Público / Ministerio de Educación y Cultura / MEC. Instituto de Investigaciones Biológicas «Clemente Estable» , Uruguay

### PARTICIPACIÓN EN EVENTOS

#### **RNA: Structure, Dynamics and Function (2016)**

Tipo: Congreso

Institución organizadora: SISSA, Italia

**Annual Meeting of the Reference Network of R+D+I in Theoretical and Computational Chemistry (2016)**

Tipo: Congreso

**Long time dynamics from short time simulations Workshop (2014)**

Tipo: Congreso

Institución organizadora: CECAM, Italia

**Young Life Scientists' Symposium (2014)**

Tipo: Simposio

Institución organizadora: Biochemical Society, UK, Inglaterra

**UK Neutron and Muon Users Meeting (NMUM) (2014)**

Tipo: Congreso

Institución organizadora: STFC ISIS, Inglaterra

**Neutron Characterisation in Fundamental and Applied Biochemistry Conferenc (2014)**

Tipo: Congreso

Institución organizadora: STFC ISIS, Inglaterra

**Neutrons in Biology and Biotechnology Conference (2014)**

Tipo: Congreso

Institución organizadora: Institut Laue-Langevin, Francia

**NSCCS User Meeting (2013)**

Tipo: Encuentro

Institución organizadora: NSCCS, UK, Inglaterra

**NSF PASI Workshop on Multiscale Modeling and Simulation (2012)**

Tipo: Congreso

Institución organizadora: Institut Pasteur de Montevideo, Uruguay

**2do Congreso Argentino de Bioinformática y Biología Computacional (2011)**

Tipo: Congreso

Institución organizadora: Asociación Argentina de Bioinformática y Biología Computacional, Uruguay

Palabras Clave: Biología Computacional Bioinformática

Areas de conocimiento:

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

**I Congreso Argentino de Bioinformática y Biología Computacional (2010)**

Tipo: Congreso

**Pasantía de Investigación (Institut de Biologie et Physico-Chimique) (2010)**

Tipo: Otro

Institución organizadora: Institut de Biologie et Physico-Chimique, Francia

**3rd Latin American Protein Society Meeting (2010)**

Tipo: Congreso

**7th Iberoamerican Congress of Biophysics (2009)**

Tipo: Congreso

**6th ICPB & 5th Southern Cone Biophysics Congress, Montevideo-Uruguay (2007)**

Tipo: Congreso

#### **5th Biochemistry and Molecular Biology Symposium (2006)**

Tipo: Congreso

Institución organizadora: Sociedad de Bioquímica y Biología Molecular, Uruguay

### **EN MARCHA**

#### **POSDOCTORADOS**

##### **IRB Postdoctoral Fellowship (2015)**

Sector Extranjero/Internacional/Otros / Insitute For Research In Biomedicine , España

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica /

### **Idiomas**

#### **Inglés**

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

#### **Español**

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

### **Áreas de actuación**

#### **CIENCIAS NATURALES Y EXACTAS**

Ciencias Biológicas/Biofísica/Modelado Molecular

### **Actuación profesional**

#### **SECTOR EXTRANJERO/INTERNACIONAL/OTROS - ESPAÑA**

Instituto de Investigación Biomédica Barcelona

#### **VÍNCULOS CON LA INSTITUCIÓN**

##### **Funcionario/Empleado (10/2015 - a la fecha)**

Post-doc ,40 horas semanales / Dedicación total

#### **SECTOR EXTRANJERO/INTERNACIONAL/OTROS - INGLATERRA**

Kings College London

#### **VÍNCULOS CON LA INSTITUCIÓN**

##### **Funcionario/Empleado (02/2013 - 02/2015)**

Post-doc ,40 horas semanales / Dedicación total

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

Institut Pasteur de Montevideo

#### **VÍNCULOS CON LA INSTITUCIÓN**

##### **Funcionario/Empleado (06/2008 - 01/2013)**

Ayudante Técnico ,40 horas semanales

## ACTIVIDADES

### LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN

#### **Desarrollo de Modelos Simplificados para Simulaciones Moleculares (01/2009 - a la fecha)**

Desarrollo de modelos de tipo Coarse Grain para acelerar simulaciones moleculares, aplicado a sistemas biológicos.

20 horas semanales

Institut Pasteur de Montevideo, Grupo de Simulaciones Biomoleculares, Integrante del equipo  
Equipo: MACHADO, M., PABLO D. DANS, PANTANO, S, ZEIDA A.

Áreas de conocimiento:

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

#### **Interacción a nivel molecular entre PKA y proteínas AKAP (01/2009 - a la fecha)**

Estudio de interacciones proteína-proteína por dinámica molecular.

20 horas semanales

Institut Pasteur de Montevideo, Grupo de Simulaciones Biomoleculares, Integrante del equipo

Equipo: PANTANO, S

Palabras clave: AKAP PKA

Áreas de conocimiento:

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

### DOCENCIA

#### **International Course: Hands-on Course on Coarse Grain Methods for Biomolecular Simulations (09/2011 - 10/2011)**

Especialización

Organizador/Coordinador

Asignaturas:

Hands-on Course on Coarse Grain Methods for Biomolecular Simulations, 40 horas, Teórico-Práctico

Áreas de conocimiento:

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

#### **AMSUD Pasteur (02/2010 - 03/2010)**

Especialización

Organizador/Coordinador

Asignaturas:

Computational Modelling and Simulations of Biological Systems, 30 horas, Teórico-Práctico

### PASANTÍAS

#### **(12/2009 - 02/2010)**

Intitut de Biologie et Phyco-Chimique, Laboratoire de Biochimie Theorique

40 horas semanales

Áreas de conocimiento:

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

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

Facultad de Ciencias - UDeLaR

### VÍNCULOS CON LA INSTITUCIÓN

#### **Funcionario/Empleado (08/2005 - 12/2008)**

Asistente, 20 horas semanales

Laboratorio de Química Teórica y Computacional (Jefe: Dra. Elena L. Coitiño)

Escalafón: Docente

Grado: Grado 1

Cargo: Interino

## ACTIVIDADES

### PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN Y DESARROLLO

**Influencia del Entorno Físicoquímico sobre la Estructura Electrónica y Reactividad de Bases de ADN: Hacia el Diseño Racional de Sondas para Diagnóstico y Fármacos para Quimioterapia Altamente Selectivos de Rutenio (08/2005 - 08/2007)**

20 horas semanales

Laboratorio de Química Teórica y Computacional

Desarrollo

Integrante del Equipo

Concluido

Financiación:

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

Equipo: COITIÑO, L. (Responsable), MACHADO, M., MERLINO A.

### DOCENCIA

**Licenciatura en Bioquímica (08/2005 - 12/2008)**

Grado

Asignaturas:

Físicoquímica Moderna Molecular, 12 horas, Práctico

**Licenciatura en Biología Humana (03/2007 - 07/2007)**

Especialización

Asignaturas:

Taller de Química Teórica y Computacional, 9 horas, Teórico-Práctico

### CARGA HORARIA

Carga horaria de docencia: Sin horas

Carga horaria de investigación: 40 horas

Carga horaria de formación RRHH: Sin horas

Carga horaria de extensión: Sin horas

Carga horaria de gestión: Sin horas

## Producción científica/tecnológica

El estudio de la biología a nivel molecular requiere actualmente integrar diversas técnicas experimentales y teórico/computaciones, cuyo producto es una racionalización termodinámica y estructural (a nivel atómico), de los observables macroscópicos de procesos bioquímicos. Uno de los mayores desafíos a los que se enfrentan los métodos de modelado molecular es que la medida que se realiza comprenda las escalas temporales y espaciales correspondientes a los datos experimentales. En tal sentido, el foco de mi trabajo doctoral y post-doctoral ha sido el desarrollo y aplicación de métodos de modelado capaces de extender los límites de no-ergodicidad de las simulaciones de dinámica molecular. Esto, por dos vías: i- modelos simplificados denominados "Coarse-Grained" con aplicaciones a sistemas de proteínas, ácidos nucleicos, lípidos y solvente acuoso; ii- técnicas avanzadas de simulación de tipo "enhanced-sampling" que logran muestrear exhaustivamente el espacio conformacional, con aplicaciones a la modulación de canales iónicos por agonistas o la variabilidad conformacional del RNA.

## Producción bibliográfica

### ARTÍCULOS PUBLICADOS

#### ARBITRADOS

**Compaction of Duplex Nucleic Acids upon Native Electrospray Mass Spectrometry (Completo, 2017)**

M.P., F.R., C.R., DARRÉ L., H.G., M.O., V.G.

ACS Central Science, v.: 3 p.:454 - 461, 2017

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica /  
Medio de divulgación: Internet  
ISSN: 23747951  
DOI: [10.1021/acscentsci.7b00084](https://doi.org/10.1021/acscentsci.7b00084)

**Functional mapping of the N-terminal arginine cluster and C-terminal acidic residues of Kir6.2 channel fused to a G protein-coupled receptor (Completo, 2017)**

Maria A. Principalli , Laura Lemel , Anaëlle Rongier , Anne-Claire Godet , Karla Langer , Jean Revilloud , DARRÉ L. , Carmen Domene , Michel Vivaudou , Christophe J. Moreau  
BBA Biomembranes, v.: 1859 p.:2144 - 2153, 2017  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Ion Channels  
ISSN: 0005-2736  
DOI: <https://doi.org/10.1016/j.bbamem.2017.07.015>

**Lateral Fenestrations in K(+)-Channels Explored Using Molecular Dynamics Simulations (Completo, 2016)**

C.J. , DARRÉ L. , V.O. , R.T. , D.P. , C. DOMENE  
Molecular Pharmaceutics, v.: 13 p.:2263 - 2273, 2016  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica /  
Medio de divulgación: Internet  
ISSN: 15438384  
**Scopus** WEB OF SCIENCE™

**Small Details Matter: The 2'- Hydroxyl as a Conformational Switch in RNA (Completo, 2016)**

DARRÉ L. , I.I. , P.D.D. , H.G. , A.H. , M.O.  
Journal of the American Chemical Society, v.: 138 p.:16355 - 16363, 2016  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica /  
ISSN: 00027863  
**Scopus** WEB OF SCIENCE™

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

DARRÉ L. , MACHADO, M. , A.B. , H.C. GONZALEZ , S.F. , PANTANO, S  
Journal of Chemical Theory and Computation, v.: 11 p.:723 - 739, 2015  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica /  
Medio de divulgación: Internet  
ISSN: 15499618  
**Scopus** WEB OF SCIENCE™

**In Silico Identification of PAP-1 Binding Sites in the Kv1.2 Potassium Channel (Completo, 2015)**

C.J. , DARRÉ L. , K.V. , K.O. , D.P. , C. DOMENE  
Molecular Pharmaceutics, v.: 12 p.:1299 - 1307, 2015  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica /  
Medio de divulgación: Internet  
ISSN: 15438384  
**Scopus** WEB OF SCIENCE™

**Antimicrobial peptide dendrimer interacts with phosphocholine membranes in a fluidity dependent manner: a neutron reflection study combined with molecular dynamics simulations (Completo, 2015)**

T.L. , DARRÉ L. , C. DOMENE , Z.U-L. , M.C. , H.W.  
Biochimica et Biophysica Acta-Biomembranes, v.: 1848 p.:2075 - 2084, 2015  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica /  
Medio de divulgación: Internet  
ISSN: 00052736  
**Scopus** WEB OF SCIENCE™

#### **Binding of Capsaicin to the TRPV1 Ion Channel (Completo, 2015)**

DARRÉ L., C. DOMENE

Molecular Pharmaceutics, v.: 12 p.:4454 - 4465, 2015

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica /

Medio de divulgación: Internet

ISSN: 15438384

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

#### **Surfactin at the Water/Air Interface and in Solution (Completo, 2015)**

J.I-F, DARRÉ L., A.K., R.T., H-H.S., C. DOMENE

Langmuir, v.: 31 p.:11097 - 11104, 2015

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica /

Medio de divulgación: Internet

ISSN: 07437463

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

#### **Molecular dynamics simulations and neutron reflectivity as an effective approach to characterize biological membranes and related macromolecular assemblies (Completo, 2015)**

DARRÉ L., J.I-F, A.K., H.W., C. DOMENE

Journal of Chemical Theory and Computation, v.: 11 p.:4875 - 4884, 2015

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica /

ISSN: 15499618

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

#### **Permeation and dynamics of an open-activated TrpV1 channel (Completo, 2014)**

DARRÉ L., S. FURINI, C. DOMENE

Journal of Molecular Biology, 2014

Palabras clave: Dinamica Molecular TRPV1 Ion permeation

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Internet

ISSN: 00222836

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

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

H.C. GONZALEZ, DARRÉ L., PANTANO, S

Journal of Physical Chemistry B, 2013

Palabras clave: multi-scale, Coarse Grained, water

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Internet

ISSN: 10895647

#### **A Zoom on Membrane Fusion through Coarse-Grained, Atomistic and Hybrid Molecular Dynamics of SNARE Proteins (Resumen, 2013)**

A. TEK, DARRÉ L., P.J.. BOND, M.S.P. SANSOM, PANTANO, S, M. BAADEN

Biophysical Journal, 2013

Palabras clave: multi-scale, Coarse Grained, water

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Internet

ISSN: 00063495

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

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

DARRÉ L., MACHADO, M., PANTANO, S

WILEY Interdisciplinary Reviews: Computational Molecular Science, v.: 2 p.:921 - 930, 2012

Palabras clave: water Coarse Grained



Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica /  
Medio de divulgación: Internet  
ISSN: 17590884

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

DARRÉ L., A. TEK, M. BAADEN, PANTANO, S  
Journal of Chemical Theory and Computation, v.: 8 p.:3880 - 3894, 2012  
Palabras clave: multi-scale, Coarse Grained, water  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica Computacional  
Medio de divulgación: Internet  
ISSN: 15499618  
**Scopus** WEB OF SCIENCE™

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

DARRÉ L., MACHADO, M., PABLO D. DANS, F. E. HERRERA, PANTANO, S  
Journal of Chemical Theory and Computation, v.: 6 p.:3793 - 3807, 2010  
Palabras clave: Coarse Grain Molecular dynamics electrostatics nucleic acids minor groove narrowing water  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica Computacional  
Medio de divulgación: Papel  
Lugar de publicación: United States  
ISSN: 15499618  
DOI: [10.1021/ct100379f](https://doi.org/10.1021/ct100379f)  
<http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/ct100379f>  
journalCode=jctcce&quickLinkVolume=6&quickLinkPage=379  
**Scopus** WEB OF SCIENCE™

## LIBROS

**Computational Tools for Chemical Biology ( Libro publicado Compilación , 2017)**

Hansel Gómez , Jurguen Walther , DARRÉ L., Ivan Ivani , Pablo Dans , Modesto Orozco  
Número de páginas: 378  
Edición: ,  
Editorial: Royal Society of Chemistry, UK  
Tipo de publicación: Investigación  
DOI: <http://dx.doi.org/10.1039/9781788010139-00165>  
Escrito por invitación  
Medio de divulgación: Papel  
ISSN/ISBN: 978-1-78801-013-9  
<http://pubs.rsc.org/en/content/ebook/978-1-78262-700-5>

## PUBLICACIÓN DE TRABAJOS PRESENTADOS EN EVENTOS

**Assessing the Accuracy of the SIRAH Force Field to Model DNA at Coarse Grain Level (2013)**

Completo  
P.D.D, DARRÉ L., MACHADO, M., ZEIDA A., A.B., PANTANO, S  
Evento: Internacional  
Descripción: 8th Brazilian Symposium on Bioinformatics  
Ciudad: Recife  
Año del evento: 2013  
Editorial: Springer  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica /  
Medio de divulgación: Internet  
DOI: [10.1007/978-3-319-02624-4\\_7](https://doi.org/10.1007/978-3-319-02624-4_7)  
[https://link-springer-com.sire.ub.edu/chapter/10.1007/978-3-319-02624-4\\_7](https://link-springer-com.sire.ub.edu/chapter/10.1007/978-3-319-02624-4_7)

## Evaluaciones

## EVALUACIÓN DE PUBLICACIONES

### REVISIONES

#### Scientific Reports ( 2017 )

Tipo de publicación: Revista  
Cantidad: Menos de 5

#### PCCP ( 2016 )

Tipo de publicación: Revista  
Cantidad: Menos de 5

#### Biophysical Journal ( 2014 )

Tipo de publicación: Revista  
Cantidad: Menos de 5

## Formación de RRHH

### TUTORÍAS CONCLUIDAS

#### POSGRADO

#### The RNA Conformational Landscape: Studying the backbone through (2016)

Tesis de maestría  
Sector Extranjero/Internacional/Otros / Universidad Autonoma de Barcelona , España  
Programa: Maestría en Bioinformatica  
Tipo de orientación: Asesor/Orientador  
Nombre del orientado: Diego Gallego  
Medio de divulgación: Papel  
País/Idioma: España, Inglés  
Palabras Clave: RNA Data Mining  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Otras Ciencias Naturales / Otras Ciencias Naturales / Bioinformatica

## Otros datos relevantes

### PREMIOS, HONORES Y TÍTULOS

#### Artículo destacado del mes de Diciembre (2016) por la Sociedad de Biofísica Española (2016)

(Nacional)  
Sociedad de Biofísica Española  
El artículo "Small Detail Matter: The 2'-Hydroxyl as a Conformational Switch in RNA" JACS, 2016, 138, pp. 16355 fue seleccionado entre los articulos destacados del mes de Diciembre de 2016 por la Sociedad de Biofísica Española.

#### Premio a mejor post-doc poster (2016)

(Internacional)  
SISSA  
El poster titulado "Looking at RNA through "eta/theta glasses"" fue seleccionado como mejor poster entre aquellos presentados por post-docs.

#### Premio mejor poster en 2do Congreso Argentino de Bioinformática y Biología Computacional (2011)

(Internacional)  
Asociación Argentina de Bioinformática y Biología Computacional

#### Beca de Maestría (2009)

(Nacional)  
ANII

## PRESENTACIONES EN EVENTOS

### RNA: Structure, Dynamics and Function (2016)

Congreso  
Looking at RNA through  $\eta/\theta$  glasses  
Italia  
Tipo de participación: Poster  
Nombre de la institución promotora: SISSA  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica

### Annual Meeting of the Reference Network of R+D+I in Theoretical and Computational Chemistry (2016)

Encuentro  
Revisiting the ribose 2'-hydroxyl group orientation in RNA: insights from the Protein Data Bank and molecular simulations  
España  
Tipo de participación: Expositor oral  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica

### Young Life Scientists' Symposium (2014)

Simposio  
Permeation and Dynamics of the Open- Activated TRPV1 Channel from MD Simulations  
Inglaterra  
Tipo de participación: Expositor oral  
Nombre de la institución promotora: Biochemical Society UK  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica

### Neutrons in Biology and Biotechnology Conference (2014)

Congreso  
Using MD simulations to refine neutron scattering reflectometry analysis  
Francia  
Tipo de participación: Poster  
Nombre de la institución promotora: Institut Laue-Langevin  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica

### Neutron Characterisation in Fundamental and Applied Biochemistry Conference (2014)

Congreso  
Using atomistic and coarse-grained simulations to refine neutron scattering reflectometry analysis  
Inglaterra  
Tipo de participación: Expositor oral  
Nombre de la institución promotora: ISIS STFC  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica

### NSCCS User Meeting (2013)

Congreso  
Human BK channel pickpocketing by GoSlo-SR family  
Inglaterra  
Tipo de participación: Poster  
Nombre de la institución promotora: NSCCS UK  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica

### NSF PASI Workshop on Multiscale Modeling and Simulation (2012)

Congreso  
SIRAH force field for proteins: application to the unstructured N17 Huntingtin peptide  
Uruguay

Tipo de participación: Poster  
Nombre de la institución promotora: NSF PASI  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica

#### **Coarse-Grained Biomolecular Modelling (2011)**

Taller  
Role of ions in DNA indirect readout by proteins revealed by Coarse Grain molecular dynamics simulations  
Suiza  
Tipo de participación: Poster  
Nombre de la institución promotora: Centre Européen de Calcul Atomique et Moléculaire (CECAM)

#### **2do Congreso de la Asociación Argentina de Bioinformática y Biología Computacional (2011)**

Congreso  
Ion-induced DNA conformational changes explored in the microsecond time scale by coarse-grain molecular dynamics simulations  
Argentina  
Tipo de participación: Poster  
Nombre de la institución promotora: Asociación Argentina de Bioinformática y Biología Computacional  
Premio a mejor poster

#### **I Congreso Argentino de Bioinformática y Biología Computacional (2010)**

Congreso  
WT4: a new coarse grain model for water  
Argentina  
Tipo de participación: Poster

#### **3rd Latin American Protein Society Meeting (2010)**

Congreso  
Possible AKAP RI-Specifer Region (RISR) binding determinants of PKA Type I revealed by molecular dynamics simulations  
Argentina  
Tipo de participación: Poster

#### **VII Iberoamerican Congress of Biophysics (2009)**

Congreso  
A Coarse Grain DMPC Lipid Bilayer Model  
Brasil  
Tipo de participación: Poster

#### **Drug Design and Discovery for Developing Countries (2008)**

Congreso  
Characterizing d-[Ru(bpy)<sub>2</sub>dppz]<sup>2+</sup> DNA probe intercalative behaviour at GG, GC and CG stops  
Italia  
Tipo de participación: Poster  
Nombre de la institución promotora: ICS-UNIDO

#### **6th ICPB & 5th Southern Cone Biophysics Congreso (2007)**

Congreso  
Sequence Dependent  $\Delta$ -[Ru(bpy)<sub>2</sub>dppz]<sup>2+</sup>-DNA Complex Dynamical Behavior  
Uruguay  
Tipo de participación: Poster

#### **Conference on Drug Development for the Third World (2006)**

Congreso  
Tuning the electron structure of [Ru(II)(dppz)<sub>2</sub>L]<sup>2+</sup> DNA damage probes by environment: a DFT-PCM study  
Italia

Tipo de participación: Poster

Nombre de la institución promotora: International Centre for Theoretical Physics, ICTP

**Eighth J.J. Giambiagi Winter School Part A: Clusters, Molecules, Biomolecules and Materials (2006)**

Congreso

Characterizing the Photophysical Behaviour in Water of a Series of  $\pi$ -[Ru(II)L<sub>2</sub>(dppz)]<sup>2+</sup> Molecular Light Switches by PCM-TDDFT

Argentina

Tipo de participación: Poster

Nombre de la institución promotora: Physics Department, FCEyN-UBA

**5th Biochemistry and Molecular Biology Symposium (2006)**

Congreso

Modelado de la Interacción del Complejo [Ru(bpy)<sub>2</sub>dppz]<sup>2+</sup> en un Dodecámero de ADN: Geometrías de Intercalación y Efectos sobre la Estructura Macromolecular

Uruguay

Tipo de participación: Poster

Nombre de la institución promotora: Biochemistry and Molecular Biology Society

## Indicadores de producción

<b>PRODUCCIÓN BIBLIOGRÁFICA</b>	<b>18</b>
<b>Artículos publicados en revistas científicas</b>	16
Completo	15
Resumen	1
<b>Trabajos en eventos</b>	1
<b>Libros y Capítulos</b>	1
Libro publicado	1
<b>EVALUACIONES</b>	<b>3</b>
<b>Evaluación de publicaciones</b>	3
<b>FORMACIÓN RRHH</b>	<b>1</b>
<b>Tutorías/Orientaciones/Supervisiones concluidas</b>	1
Tesis de maestría	1