



PABLO IGNACIO DANIEL
DANS PUIGGRÒS

Doctor



pdans@pasteur.edu.uy
<https://danslab.xyz>

Gral Fructuoso Rivera 1350
, 50000, Salto, Uruguay
091695145

SNI

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

Fecha de publicación: 22/09/2025
Última actualización: 22/09/2025

Datos Generales

INSTITUCIÓN PRINCIPAL

Universidad de la República/ Centro Universitario Regional Litoral Norte / Departamento de Ciencias Biológicas / Uruguay

DIRECCIÓN INSTITUCIONAL

Institución: Universidad de la República / Centro Universitario Regional Litoral Norte / Sector Educación Superior/Público
/ Departamento de Ciencias Biológicas

Dirección: Gral. Fructuoso Rivera 1350 / 50000

País: Uruguay / Salto / Salto

Teléfono: (50000) 47334816

Correo electrónico/Sitio Web: pdans@pasteur.edu.uy <https://danslab.xyz>

Formación

Formación académica

CONCLUIDA

DOCTORADO

Doctorado en Química (2002 - 2008)

Universidad de la República - Facultad de Química , Uruguay

Título de la disertación/tesis/defensa: Modelado de las características estructurales y mecanismo de acción molecular de compuestos de Pd(II) y Pt(II) con potencial acción antineoplásica

Tutor/es: Elena Laura Coitiño Izaguirre

Obtención del título: 2008

Financiación:

Universidad de la República / Facultad de Química , Uruguay

Palabras Clave: Reactividad química Compuestos de Pt(II) y Pd(II) modelado cuántico y QM/MM

Simulaciones de ADN Data mining sobre descriptores fisicoquímicos

Áreas de conocimiento:

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

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Dinámica Molecular y técnicas de data mining

GRADO

Licenciatura en Bioquímica (1992 - 2001)

Universidad de la República - Facultad de Ciencias , Uruguay

Título de la disertación/tesis/defensa: Modelado de la unión covalente entre fármacos para el tratamiento del cáncer de la familia del Cisplatino y el ADN : análisis de la viabilidad molecular de compuestos alternativos de Pd(II)

Tutor/es: Elena Laura Coitiño Izaguirre

Obtención del título: 2001

Financiación:

Universidad de la República / Facultad de Química , Uruguay

Palabras Clave: Modelado cuántico Cisplatino y análogo de Pd(II) Interacción con nucleobases

Áreas de conocimiento:

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

EN MARCHA

MAESTRÍA

Maestría en Química (UDELAR-PEDECIBA) (2002)

Universidad de la República, Facultad de Química, Uruguay

Título de la disertación/tesis/defensa: Modelado de las características estructurales y mecanismo de acción molecular de compuestos de Pd(II) y Pt(II) con potencial acción antineoplásica

Tutor/es: Dra. Laura Coitño

Sitio web de la disertación/tesis/defensa: [Culminados todos los cursos, actividades curriculares y trabajo de tesis planificado, y presentación oral previa a la defensa. Se solicitó pasaje a Doctorado. Propuesta fue aceptada en diciembre 2004.](#)

Palabras Clave: Compuestos de Pt(II) y Pd(II) Modelado cuantico Antitumorales Mecanismo de acción

Areas de conocimiento:

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

Formación complementaria

CONCLUIDA

POSDOCTORADOS

Desarrollo de modelos para ácidos nucleicos y bioinformática (2011 - 2019)

Sector Extranjero/Internacional/Otros / Instituto de Investigación Biomédica Barcelona, España

Palabras Clave: Simulaciones atomísticas Simulaciones coarse-grain Bases de datos experimentales

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica computacional y Bioinformática

Aplicación de técnicas de simulación para el estudio de biomoléculas de interés biomédico (2008 - 2013)

Sector Organizaciones Privadas sin Fines de Lucro/Sociedades Científico-Tecnológicas / Institut

Pasteur de Montevideo / Institut Pasteur de Montevideo, Uruguay

Palabras Clave: Moledos Coarse-Grain de ácidos nucleicos Simulación de proteínas

Areas de conocimiento:

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

Desarrollo de fármacos para el mal de Alzheimer (2010 - 2010)

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

Palabras Clave: Enfermedades neurodegenerativas Desarrollo experimental e in silico de fármacos

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Diseño experimental e in silico de fármacos

CURSOS DE CORTA DURACIÓN

Latin American postgraduate program of Biophysics (01/2009 - 01/2009)

Sector Extranjero/Internacional/Otros / Sociedad Brasileira de Biofísica, Brasil

32 horas

Palabras Clave: Biofísica

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica /

Biología de Sistemas (PEDECIBA) (01/2005 - 01/2005)

Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Ciencias, Uruguay

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biología de Sistemas

Cálculo numérico y computación (01/2005 - 01/2005)

Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química , Uruguay
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Computación / Calculo numérico y computación

Metales en Sistemas Biológicos (01/2005 - 01/2005)

Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química , Uruguay
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Inorgánica y Nuclear / Bioinorgánica

Química Bioinorgánica (01/2003 - 01/2003)

Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química , Uruguay
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Inorgánica y Nuclear / Bioinorgánica

Introducción al QSAR y diseño racional de comps. bioactivos (01/2002 - 01/2002)

Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Ciencias , Uruguay
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Química Teórica / Modelado Cuántico

Radicales libres, especies excitadas y defensas antioxidantes en sistemas biológicos (01/1995 - 01/1995)

Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Medicina , Uruguay
Areas de conocimiento:
Ciencias Médicas y de la Salud / Medicina Básica / Bioquímica y Biología Molecular /

PARTICIPACIÓN EN EVENTOS

EELA-2 Grid Tutorial in Montevideo (2009)

Tipo: Otro
Institución organizadora: Facultad de Ingeniería - Proyecto EELA-2, Uruguay
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Computación / Grid computing

Cursos de la 8va escuela de invierno Giambiagi (2006)

Tipo: Otro
Institución organizadora: Universidad de Buenos Aires, Argentina
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional

Curso: "Introducción a la programación / Programación I" (2005)

Tipo: Otro
Institución organizadora: Centro de matemática - Fac. Ciencias / Fac. Ingeniería, Uruguay
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Computación / Programación

Curso: "Métodos para la Simulación del Solvente" en el marco del Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina (QUITEL) XXX (2004)

Tipo: Otro
Institución organizadora: Universidad de Porto, Portugal
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional

Curso: "Métodos experimentales para el estudio de la cinética de procesos químicos" (2003)

Tipo: Otro
Institución organizadora: Facultad de Ciencias, Uruguay
Areas de conocimiento:

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

Reconocimiento de las prácticas docentes en ciencias (2002)

Tipo: Seminario

Institución organizadora: Comisión Sectorial de Enseñanza - Fac. Ciencias - UDELAR, Uruguay

Curso: "Funcionales de la Densidad" en el marco del Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina (QUITEL) XXVIII (2002)

Tipo: Otro

Institución organizadora: Facultad de Química - Facultad de Ciencias UDELAR, Uruguay

Áreas de conocimiento:

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

Educación a distancia, metodología pedagógica, medios técnicos y tutorías (2001)

Tipo: Otro

Institución organizadora: Agencia Española de Cooperación Internacional - Oficina de Planeamiento y Presupuesto - UDELAR, Uruguay

Introducción a la problemática del aula universitaria (2001)

Tipo: Seminario

Institución organizadora: Comisión Sectorial de Enseñanza - UDELAR, Uruguay

Curso-Taller de Química Computacional módulo II (modelando la cinética de reacciones químicas con herramientas basadas en la VTST) (2001)

Tipo: Taller

Institución organizadora: Facultad de Ciencias - PEDECIBA, Uruguay

Áreas de conocimiento:

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

Curso-Taller de Química Computacional módulo I (modelando la estructura y propiedades de especies participantes en reacciones químicas) (1998)

Tipo: Taller

Institución organizadora: Facultad de Ciencias - PEDECIBA, Uruguay

Áreas de conocimiento:

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

Curso: "Termodinámica Estadística y Teoría Cinética Estadística" (1998)

Tipo: Otro

Institución organizadora: Facultad de Ciencias - PEDECIBA, Uruguay

Áreas de conocimiento:

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

Idiomas

Español

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

Francés

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

Inglés

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

Catalán

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

Áreas de actuación

CIENCIAS NATURALES Y EXACTAS

Ciencias Químicas /Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica /química teórica, modelado y simulaciones biomoleculares

CIENCIAS NATURALES Y EXACTAS

Ciencias Biológicas /Biofísica /Biofísica computacional

CIENCIAS NATURALES Y EXACTAS

Ciencias de la Computación e Información /Ciencias de la Información y Bioinformática /Bioinformática, cálculos de alto rendimiento, clustering, grid computing

CIENCIAS MÉDICAS Y DE LA SALUD

Medicina Básica /Farmacología y Farmacia /Diseño de fármacos asistido por computadora

Actuación profesional

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

Unidad de Bioinformática

VÍNCULOS CON LA INSTITUCIÓN

Otro (01/2020 - a la fecha)

Investigador Asociado (honorario) 5 horas semanales

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

Centro Universitario Regional Litoral Norte / Departamento de Ciencias Biológicas

VÍNCULOS CON LA INSTITUCIÓN

Funcionario/Empleado (08/2019 - a la fecha) Trabajo relevante

Profesor agregado (Gdo. 4), DT (en espera) 35 horas semanales

Escalafón: Docente

Grado: Grado 4

Cargo: Interino

ACTIVIDADES

LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN

Desarrollo de modelos multiescala para el estudio de la estructura y dinámica de ácidos nucleicos (08/2019 - a la fecha)

Estudio del impacto estructural de las bases modificadas en el epitranscriptoma y desarrollo de modelos de grano-grueso para el estudio de la cromatina teniendo en cuenta los estados epigenéticos.

Fundamental

35 horas semanales

Departamento de Ciencias Biológicas, Coordinador o Responsable

Equipo: Pablo Ignacio Daniel DANS PUIGGRÒS, GRILLE, L.

Palabras clave: Biosimulaciones Campos de fuerza ácidos nucleicos modelado molecular

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica computacional

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica computacional

SECTOR EXTRANJERO/INTERNACIONAL/OTROS - ESPAÑA

Instituto de Investigación Biomédica Barcelona / Departamento de Biología Estructural y Computacional

VÍNCULOS CON LA INSTITUCIÓN

Otro (06/2019 - a la fecha)

Investigador Honorario 5 horas semanales

Funcionario/Empleado (02/2011 - 05/2019)

Investigador Asociado 40 horas semanales / Dedicación total

Estudiante Postdoctoral en el grupo de Modelado Molecular y Bioinformática bajo la supervisión del Prof. Modesto Orozco.

ACTIVIDADES

LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN

Desarrollo de modelos coarse-grain de ácidos nucleicos y bioinformática. (02/2011 - a la fecha)

40 horas semanales

Programa de Biología Estructural y Computacional, Grupo de Modelado Molecular y Bioinformática, Integrante del equipo

Equipo: M. OROZCO, A. PÉREZ, I. FAUSTINO

Palabras clave: Simulaciones atómicas Simulaciones coarse-grain Bases de datos experimentales

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica computacional y Bioinformática

PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN Y DESARROLLO

Multiscale simulation of nucleic acids (08/2012 - 08/2017)

Contratado para trabajar para el European Council Research advanced grant (SimDNA) a cargo del Prof. M. Orozco. Financiado por la UE.

40 horas semanales

Institute for Research in Biomedicine, Molecular Modelling and Bioinformatics

Investigación

Integrante del Equipo

En Marcha

Financiación:

Institute for Research in Biomedicine, España, Remuneración

Equipo: M. OROZCO (Responsable), F. BATTISTINI

Palabras clave: Helical conformations DNA mechanical properties MD simulations

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Simulaciones Biomoleculares

DOCENCIA

(06/2013 - 06/2013)

Doctorado

Asignaturas:

Hands-on training in molecular dynamics simulation of coarse-grained nucleic acids at the base-level, 30 horas, Teórico-Práctico

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Simulaciones Biomoleculares

SECTOR EXTRANJERO/INTERNACIONAL/OTROS - ARGENTINA

Facultad de Ciencias Exactas y Naturales Universidad de Buenos Aires / Instituto de Calculo

VÍNCULOS CON LA INSTITUCIÓN

Funcionario/Empleado (07/2019 - 07/2021)

Investigador Asociado (CONICET) 20 horas semanales

ACTIVIDADES

LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN

Desarrollo de modelos multiescala para el estudio de la estructura y dinámica de ácidos nucleicos (07/2019 - a la fecha)

Estudio del efecto en la estructura y dinámica secuencia dependiente del ADN de la modificación epigenética 6-metil-adenina, y estudio de complejos Proteínas-ARN.

Fundamental

20 horas semanales

Instituto de Calculo , Coordinador o Responsable

Equipo: Pablo Ignacio Daniel DANS PUIGGRÒS, TURJANSKY, A. , MARTI, M.

Palabras clave: Simulaciones de dinámica molecular modificaciones epigenéticas interacción ácidos nucleicos-proteínas modelado molecular

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica computacional

SECTOR EXTRANJERO/INTERNACIONAL/OTROS - ESPAÑA

Barcelona Supercomputing Center / Departamento de Ciencias de la Vida

VÍNCULOS CON LA INSTITUCIÓN

Funcionario/Empleado (02/2011 - 05/2019)

Investigador posdoctoral 40 horas semanales / Dedicación total

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

Institut Pasteur de Montevideo / Simulaciones Biomoleculare

VÍNCULOS CON LA INSTITUCIÓN

Funcionario/Empleado (03/2009 - 01/2013)

Investigador asociado 40 horas semanales / Dedicación total

Estudiante de Posdoctorado en el Grupo de Simulaciones Biomoleculares. Desarrollo de modelos Coarse-Grain para ácidos nucleicos y solventes acuosos. Homology modeling, docking y simulaciones de proteínas.

Funcionario/Empleado (10/2007 - 03/2009)

Asistente de investigación 40 horas semanales

Estudiante de Posdoctorado en el Grupo de Simulaciones Biomoleculares. Desarrollo de modelos Coarse-Grain para ácidos nucleicos y solventes acuosos. Homology modeling, docking y simulaciones de proteínas.

Becario (02/2006 - 10/2007)

Ayudante de investigación 30 horas semanales

Unidad de Bioinformática (UBI). Participación en las líneas de investigación del Lab. de Neurodegeneración a cargo del Prof. Dr. Luis Barbeito, colaboración en el dictado de los cursos de la UBI, generación de material didáctico y desarrollo de software para el pipeline de proteínas y el trabajo de simulación con proteínas (proH.). Formación de recursos-humanos en técnicas de programación en lenguaje Fortran.

ACTIVIDADES

LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN

Desarrollo de Modelos Coarse-Grained para Acidos Nucleicos (10/2007 - a la fecha)

20 horas semanales
Grupos a 5 años, Simulaciones Biomoleculares , Integrante del equipo
Equipo: PANTANO, S, ZEIDA, A. , MACHADO, M. R.
Palabras clave: Modelos Coarse-Grain Acidos nucleicos
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica/Bioinformatica

Desarrollo de fármacos para HIV (03/2007 - a la fecha)

20 horas semanales
Grupos a 5 años, Simulaciones Biomoleculares , Integrante del equipo
Equipo: PANTANO, S, MACHADO, M. R.
Palabras clave: HIV Desarrollo de fármacos
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica/Bioinformatica

PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN Y DESARROLLO

Descripcion de interacciones proteina-proteina relacionadas con la transcripcion del VIH-1 utilizando metodos teoricos. (07/2009 - 07/2011)

20 horas semanales
Institut Pasteur de Montevideo , Grupo de Simulaciones Biomoleculares
Investigación
Integrante del Equipo
Cancelado
RRHH formados en el proyecto:
Especialización:1
Maestría/Magister:1
Equipo: MACHADO, M. , PANTANO, S (Responsable)
Palabras clave: Modelado y Simulaciones Biomoleculares
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica/Bioinformatica

Desarrollo de Iniciativas Biotecnológicas: Vinculación y Valorización de la Investigación (08/2005 - 12/2005)

20 horas semanales
Institut Pasteur de Montevideo , Unidad de Bioinformatica
Desarrollo
Integrante del Equipo
Concluido
Equipo: EHRLICH, R. (Responsable)

DOCENCIA

AMSUD Pasteur (03/2010 - 03/2010)

Doctorado
Organizador/Coordinador
Asignaturas:
Computational Modelling and Simulations of Biological Systems, 40 horas, Teórico-Práctico
Biología Molecular / Genética Molecular 2, 5 horas, Teórico

PASANTÍAS

(01/2007 - a la fecha)

Unidad de Bioinformática
40 horas semanales

(01/2007 - a la fecha)

Unidad de Bioinformática
40 horas semanales

(09/2010 - 10/2010)

Universidad de Barcelona, Facultad de Farmacia
40 horas semanales
Áreas de conocimiento:
Ciencias Médicas y de la Salud / Medicina Básica / Farmacología y Farmacia / Diseño de fármacos asistido por computadora

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

Facultad de Ciencias / Instituto de Química Biológica

VÍNCULOS CON LA INSTITUCIÓN

Funcionario/Empleado (09/2001 - 03/2009)

Asistente 30 horas semanales
Laboratorio de Química Teórica y Computacional del Instituto de Química Biológica. Con extensiones horarias de 36, 39 y 48 hs. semanales financiadas por proyectos de investigación, llamados internos a masificación y/o proyectos de enseñanza.
Escala: Docente
Grado: Grado 2
Cargo: Efectivo

Funcionario/Empleado (10/2003 - 03/2005)

Asistente Académico del Decano 20 horas semanales
A cargo de la ejecución de todos los rubros presupuestales de la institución. Responsable del Servicio de Informática Central y del Centro de Documentación Científica y Biblioteca. Con dedicaciones de 20, 27 y 40 hs en los períodos octubre 2003 agosto 2004, setiembre 2004 enero 2005 y febrero 2005 marzo 2005 respectivamente.
Escala: Docente
Grado: Grado 5
Cargo: Interino

Funcionario/Empleado (06/1995 - 10/1998)

Ayudante 20 horas semanales
A cargo del servicio de Informática de la Facultad de Ciencias. Co-responsable de la instalación del primer servidor de la Facultad de Ciencias, del Centro de Documentación Científica y Biblioteca (Tristan Narvaja). Co-responsable de la instalación de la red en el nuevo edificio de Malvín Norte.
Escala: Docente
Grado: Grado 1
Cargo: Interino

ACTIVIDADES

LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN

Modelado de la estructura, propiedades fisicoquímicas, interacción, transformación y cinética de biomoléculas relevantes para el desarrollo, diagnóstico y tratamiento (09/2001 - a la fecha)

20 horas semanales
Instituto de Química Biológica, Laboratorio de Química Teórica y Computacional, Otros
Equipo:
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / química teórica

PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN Y DESARROLLO

Influencia del entorno fisicoquímico sobre la estructura electrónica y reactividad de bases de ADN:

hacia el diseño racional de sondas para diagnóstico y fármacos para quimioterapia altamente selectivos de Ru(II) (01/2004 - 12/2006)

20 horas semanales

Instituto de Química Biológica , Laboratorio de Química Teórica y Computacional

Desarrollo

Integrante del Equipo

Concluido

Financiación:

Comisión Sectorial de Investigación Científica, Uruguay, Apoyo financiero

Equipo: COITIÑO, L. (Responsable)

Modelado de la estructura y mecanismo de acción molecular de compuestos de potencial acción antineoplásica de Pd(II) y Pt(II) (01/2003 - 12/2004)

40 horas semanales

Instituto de Química Biológica , Laboratorio de Química Teórica y Computacional

Coordinador o Responsable

Concluido

Financiación:

Comisión Sectorial de Investigación Científica, Uruguay, Apoyo financiero

Equipo:

Modelado de la estructura y mecanismo de acción molecular de compuestos de potencial acción antineoplásica de Pd(II) y Pt(II) con Piridinas (01/2002 - 12/2002)

40 horas semanales

Instituto de Química Biológica , Laboratorio de Química Teórica y Computacional

Coordinador o Responsable

Concluido

Financiación:

Comisión Sectorial de Investigación Científica, Uruguay, Apoyo financiero

Equipo:

Estudio del mecanismo de acción del Cisplatino y proposición de nuevos análogos como agentes quimioterapéuticos (01/2000 - 12/2002)

20 horas semanales

Instituto de Química Biológica , Laboratorio de Química Teórica y Computacional

Investigación

Integrante del Equipo

Concluido

Financiación:

Comisión Sectorial de Investigación Científica, Uruguay, Apoyo financiero

Equipo: COITIÑO, L. (Responsable)

Implementación de un sistema semi-presencial para los dos primeros años de la Licenciatura en Bioquímica (01/2001 - 12/2001)

20 horas semanales

Instituto de Química Biológica , Laboratorio de Química Teórica y Computacional

Integrante del Equipo

Concluido

Equipo: COITIÑO, L. (Responsable)

DOCENCIA

Licenciatura en Bioquímica (08/1999 - 12/2008)

Grado

Organizador/Coordinador

Asignaturas:

Fisicoquímica II módulo Estructura y Propiedades Moleculares (EPM), 20 horas, Teórico-Práctico

Fisicoquímica Moderna a EPM, 20 horas, Teórico-Práctico

Áreas de conocimiento:

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

PEDECIBA (12/2008 - 12/2008)

Doctorado

Invitado

Asignaturas:

Machine Learning and Statistical Learning for Bioinformatics and Genetics, 3 horas, Teórico-Práctico

Áreas de conocimiento:

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

Educación Permanente - UDELAR (12/2007 - 12/2007)

Especialización

Organizador/Coordinador

Asignaturas:

Data Mining en Bioinformática, 4 horas, Teórico-Práctico

Áreas de conocimiento:

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

PEDECIBA (06/2007 - 08/2007)

Doctorado

Organizador/Coordinador

Asignaturas:

Introducción a la programación de aplicaciones bioinformáticas en BASH, 3 horas, Práctico

Áreas de conocimiento:

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

PEDECIBA (08/1999 - 06/2007)

Doctorado

Organizador/Coordinador

Asignaturas:

3. Curso-Taller de Química Computacional módulo I (modelando la estructura y propiedades de especies participantes en reacciones químicas), 8 horas, Teórico-Práctico

Áreas de conocimiento:

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

Licenciatura en Cs Biológicas y Bioquímica (03/2006 - 06/2007)

Grado

Organizador/Coordinador

Asignaturas:

Química General y Química I, 3 horas, Teórico

Áreas de conocimiento:

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

Educación Permanente - UDELAR (06/2002 - 06/2006)

Especialización

Organizador/Coordinador

Asignaturas:

6. Bioinformática estructural: Diseño y visualización asistida por PC de la estructura 3D de moléculas y macromoléculas, 6 horas, Teórico-Práctico

Áreas de conocimiento:

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

PEDECIBA (03/2002 - 06/2005)

Doctorado

Organizador/Coordinador

Asignaturas:

Curso-Taller de Química Computacional módulo II (modelando la cinética de reacciones químicas)

micas con herramientas basadas en la VTST), 8 horas, Teórico-Práctico

Áreas de conocimiento:

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

PASANTÍAS

(12/2005 - 12/2005)

Universidad de Buenos Aires, Departamento de Química Inorgánica, Analítica y Química Física
40 horas semanales

(09/2004 - 10/2004)

Universidad de Buenos Aires, Departamento de Química Inorgánica, Analítica y Química Física
40 horas semanales

(09/2003 - 10/2003)

Universidad de Buenos Aires, Departamento de Química Inorgánica, Analítica y Química Física
40 horas semanales

GESTIÓN ACADÉMICA

Miembro suplente de la delegación docente (04/2006 - 03/2009)

Facultad de Ciencias, Consejo
Participación en consejos y comisiones

Miembro suplente de la delegación docente (06/2007 - 03/2009)

Facultad de Ciencias, Comisión Coordinadora Docente de la Licenciatura en Bioquímica
Participación en consejos y comisiones

Miembro de la comisión encargada del funcionamiento del servicio central de informática de la Facultad de Ciencias (01/2003 - 12/2006)

Facultad de Ciencias, Servicio de Informática
Participación en consejos y comisiones

SECTOR EMPRESAS/PÚBLICO - EMPRESA PÚBLICA - URUGUAY

Comisión Sectorial de Enseñanza - UDeLaR

VÍNCULOS CON LA INSTITUCIÓN

Funcionario/Empleado (01/2003 - 12/2003)

Asistente 20 horas semanales
Comisión de Educación a Distancia (Programa Institucional de Educación a Distancia) de la Comisión Sectorial de Enseñanza (CSE). Elaboración de un documento diagnóstico sobre la situación de la EaD y la incorporación de nuevas tecnologías en las carreras de grado de la UdeLaR.

CARGA HORARIA

Carga horaria de docencia: 5 horas
Carga horaria de investigación: 24 horas
Carga horaria de formación RRHH: 19 horas
Carga horaria de extensión: 8 horas
Carga horaria de gestión: 4 horas

Producción científica/tecnológica

Mis investigaciones abarcan las áreas de la biología computacional, biofísica teórica, bioinformática estructural y química teórica y computacional. He centrado mi interés en la biofísica y fisicoquímica de sistemas complejos a través del modelado de la estructura, propiedades físicas y químicas, interacción, transformación y cinética de moléculas en sistemas de interés biológico/biomédico, así como en el desarrollo de modelos multi-escala para su estudio. Desde el 2008 trabajo intensamente en el desarrollo de modelos y hamiltonianos multi-escala de ácidos nucleicos y solvente (JCTC

2010a, JCTC 2010b), participando en la creación del campo de fuerza unificado de grano-grueso SIRAH (5 artículos en revistas internacionales) y del campo de fuerza atómico PARMBSC1 (NATURE METHODS 2016). A su vez, he co-dirigido varios posgrados centrados en el desarrollo de modelos atómicos y mesoscópicos de cromatina y cromosomas. En el 2011 he iniciado una segunda línea de investigación propia sobre el estudio de los polimorfismos dependientes de la secuencia en el ADN (NAR 2012). Dicha línea, que dio lugar a varias publicaciones en revistas de muy alto impacto (NAR 2014a, NAR 2014b, NAR 2016b, JCPL 2016, NAR 2019a, NAR 2019b), me ha permitido ganar experiencia en data mining de bases de datos estructurales en 3D, refinamiento de estructuras de RMN (NAR 2017), y simulaciones en entornos cristalinos (CHEM 2019). En 2014 he iniciado una tercera línea de investigación propia sobre el espacio conformacional de los ARN y su dinámica (JACS 2016, CHEM 2018, BIOINFORMATICS 2019), y en 2019 una línea sobre el impacto estructural de modificaciones epigenéticas tanto de la cromatina (llegando a los cromosomas) como del epitranscriptoma. Mi especialidad es la estructura, dinámica, flexibilidad, muestreo conformacional, propiedades físicas dependientes de la secuencia y evolución (SCIENCE ADVANCES 2016) de ácidos nucleicos, incluyendo el efecto de las modificaciones epigenéticas (ACTA NEUROPATHOLOGICA 2019), apareamientos no canónicos (NAR 2015), e interacción con proteínas (NAR 2018, J.MOL.BIOL. 2019). Mis trabajos sobre el ADN y sus polimorfismos estructurales me valieron ser el primer sudamericano en integrar el Ascona B-DNA Consortium (<https://bisi.ibcp.fr/ABC/Welcome.html>), un consorcio internacional que reúne investigadores de Europa y Estados Unidos y que lleva 18 años trabajando sobre las propiedades secuencia dependientes del ADN. En 2019 y 2021 he publicado como primer autor y autor de correspondencia el último trabajo del ABC (NAR 2019b, BIOPHYS.REV 2021). He centrado mi investigación los últimos años en el desarrollo de herramientas para estudiar la organización 3D/4D del genoma de humanos, levaduras y tripanosomas (NAT.COMM 2021, NAT.SMB. 2022). También formo parte de Grupo Interdisciplinario dedicado a la predicción de la estructura 3D de péptidos bioactivos extraídos de la flora nativa. Soy miembro de la Sociedad de Biofísica de España, de la Red Española de Supercomputación, de la Sociedad Uruguaya de Biociencias, de la Sociedad de Bioquímica y Biología Molecular del Uruguay, de la Sociedad de Biofísica de Uruguay, y del Club del ARN del Uruguay.

Producción bibliográfica

ARTÍCULOS PUBLICADOS

ARBITRADOS

Special issue: Multiscale simulations of DNA from electrons to nucleosomes (Completo, 2024)

JOHN H. MADDOCKS , PABLO D. DANS , THOMAS H. CHEATHAM , SARAH HARRIS , CHARLES LAUGHTON , MODESTO OROZCO , LOIS POLLACK , WILMA K. OLSON

Biophysical Reviews, v.: 16 p.:259 - 262, 2024

Lugar de publicación: Germany

ISSN: 18672450

E-ISSN: 18672469

DOI: [10.1007/s12551-024-01204-7](https://doi.org/10.1007/s12551-024-01204-7)

<https://doi.org/10.1007/s12551-024-01204-7>

WEB OF SCIENCE™ Scopus®

Ramachandran-like Conformational Space for DNA (Completo, 2024)

GABRIELA DA ROSA , LEANDRO GRILLE , PABLO D. DANS

Journal of Chemical Information and Modeling, v.: 64 p.:8339 - 8348, 2024

Lugar de publicación: United states

ISSN: 15499596

E-ISSN: 1549960X

DOI: [10.1021/acs.jcim.4c01294](https://doi.org/10.1021/acs.jcim.4c01294)

<https://doi.org/10.1021/acs.jcim.4c01294>

WEB OF SCIENCE™ Scopus®

modXNA: A Modular Approach to Parametrization of Modified Nucleic Acids for Use with Amber Force Fields (Completo, 2024)

OLIVIA LOVE , RODRIGO GALINDO-MURILLO , DANIEL R. ROE , PABLO D. DANS , THOMAS E. CHEATHAM III , CHRISTINA BERGONZO

Journal of Chemical Theory and Computation, v.: 20 p.:9354 - 9363, 2024

Lugar de publicación: United states

ISSN: 15499618
E-ISSN: 15499626
DOI: [10.1021/acs.jctc.4c01164](https://doi.org/10.1021/acs.jctc.4c01164)
<https://doi.org/10.1021/acs.jctc.4c01164>



Multiscale simulations of DNA from electrons to nucleosomes: 22 years of the Ascona B-DNA Consortium (Completo, 2024)

PABLO DANS
Biophysical Reviews, 2024
Lugar de publicación: Germany
Escrito por invitación
ISSN: 18672450
E-ISSN: 18672469
DOI: [10.1007/s12551-024-01194-6](https://dx.doi.org/10.1007/s12551-024-01194-6)
<http://dx.doi.org/10.1007/s12551-024-01194-6>
WEB OF SCIENCE Scopus

The pseudotorsional space of RNA (Completo, 2023)

LEANDRO GRILLE, DIEGO GALLEGRO, LEONARDO DARRÉ, GABRIELA DA ROSA, FEDERICA BATTISTINI, MODESTO OROZCO, PABLO D. DANS
RNA, v.: 29 p.:1896 - 1909, 2023
Medio de divulgación: Otros
Lugar de publicación: United states
ISSN: 13558382
E-ISSN: 14699001
DOI: [10.1261/rna.079821.123](https://dx.doi.org/10.1261/rna.079821.123)
<http://dx.doi.org/10.1261/rna.079821.123>
Submitido a RNA Journal para revisión (diciembre 2022).
WEB OF SCIENCE Scopus

Histone H3 serine-57 is a CHK1 substrate whose phosphorylation affects DNA repair (Completo, 2023)

NIKOLAOS PARISIS, PABLO D. DANS, MUHAMMAD JBARA, BALVEER SINGH, DIANE SCHAUSI-TIFFOCHE, DIEGO MOLINA-SERRANO, ISABELLE BRUN-HEATH, DENISA HENDRYCHOVÁ, SUMAN KUMAR MAITY, DIANA BUITRAGO, RAFAEL LEMA, THIZIRI NAIT ACHOUR, SIMONA GIUNTA, MICHAEL GIRARDOT, NICOLAS TALAREK, VALÉRIE ROFIDAL, KATERINA DANEZI, DAMIEN COUDREUSE, MARIE-NOËLLE PRIOLEAU, ROBERT FEIL, MODESTO OROZCO, ASHRAF BRIK, PEI-YUN JENNY WU, LILIANA KRASINSKA, DANIEL FISHER
Nature Communications, v.: 14 2023
Lugar de publicación: United kingdom
E-ISSN: 20411723
DOI: [10.1038/s41467-023-40843-4](https://dx.doi.org/10.1038/s41467-023-40843-4)
<http://dx.doi.org/10.1038/s41467-023-40843-4>
WEB OF SCIENCE Scopus

An open call for contributions to a special issue of Biophysical Reviews focused on multiscale simulations of DNA from electrons to nucleosomes (Completo, 2023)

WILMA K. OLSON, JOHN H. MADDOCKS, PABLO D. DANS, THOMAS H. CHEATHAM, SARAH HARRIS, CHARLIE LAUGHTON, MODESTO OROZCO, LOIS POLLACK
Biophysical Reviews, v.: 15 p.:1901 - 1902, 2023
Lugar de publicación: Germany
Escrito por invitación
ISSN: 18672450
E-ISSN: 18672469
DOI: [10.1007/s12551-023-01118-w](https://dx.doi.org/10.1007/s12551-023-01118-w)
<http://dx.doi.org/10.1007/s12551-023-01118-w>
WEB OF SCIENCE Scopus

MiOS, an integrated imaging and computational strategy to model gene folding with nucleosome resolution (Completo, 2022) Trabajo relevante

MARIA VICTORIA NEGUEMBOR, JUAN PABLO ARCON, DIANA BUITRAGO, RAFAEL LEMA,

JÜRGEN WALTHER , XIMENA GARATE , LAURA MARTIN , PABLO ROMERO , JUMANA ALHAJ ABED , MARTA GUT , JULIE BLANC , MELIKE LAKADAMYALI , CHAO-TING WU , ISABELLE BRUN HEATH , MODESTO OROZCO , PABLO D. DANS , MARIA PIA COSMA
Nature Structural & Molecular Biology, v.: 29 p.:1011 - 1023, 2022
Lugar de publicación: United kingdom
ISSN: 15459993
E-ISSN: 15459985
DOI: [10.1038/s41594-022-00839-y](https://doi.org/10.1038/s41594-022-00839-y)
<http://dx.doi.org/10.1038/s41594-022-00839-y>
WEB OF SCIENCE™ Scopus®

Molecular basis of Arginine and Lysine DNA sequence-dependent thermo-stability modulation (Completo, 2022)

BENJAMIN MARTIN , PABLO D. DANS , MIŁOSZ WIECZÓR , NURIA VILLEGAS , ISABELLE BRUN-HEATH , FEDERICA BATTISTINI , MONTSERRAT TERRAZAS , MODESTO OROZCO
PLoS Computational Biology, v.: 18 p.:1 - 20, 2022
Lugar de publicación: United states
E-ISSN: 15537358
DOI: [10.1371/journal.pcbi.1009749](https://doi.org/10.1371/journal.pcbi.1009749)
<http://dx.doi.org/10.1371/journal.pcbi.1009749>
Scopus®

Antimicrobial peptides in the seedling transcriptome of the tree legume *Peltophorum dubium* (Completo, 2021)

PABLO D. DANS , SUSANA RODRÍGUEZ-DECUADRO , GABRIELA DA ROSA , SANTIAGO RADÍO , MARIANA BARRACO-VEGA , ANA MARIA BENKO-ISEPPON , PABLO SMIRCICH , GIANNA CECCHETTO
Biochimie, v.: 180 p.:229 - 242, 2021
Lugar de publicación: Netherlands
ISSN: 03009084
DOI: [10.1016/j.biochi.2020.11.005](https://doi.org/10.1016/j.biochi.2020.11.005)
<http://dx.doi.org/10.1016/j.biochi.2020.11.005>
Scopus®

Impact of DNA methylation on 3D genome structure (Completo, 2021)

PABLO D. DANS , DIANA BUITRAGO , MIREIA LABRADOR , JUAN PABLO ARCON , RAFAEL LEMA , OSCAR FLORES , ANNA ESTEVE-CODINA , JULIE BLANC , NURIA VILLEGAS , DAVID BELLIDO , MARTA GUT , SIMON C. HEATH , IVO G. GUT , ISABELLE BRUN HEATH , MODESTO OROZCO
Nature Communications, v.: 12 2021
Lugar de publicación: United kingdom
E-ISSN: 20411723
DOI: [10.1038/s41467-021-23142-8](https://doi.org/10.1038/s41467-021-23142-8)
<http://dx.doi.org/10.1038/s41467-021-23142-8>
Scopus®

The Impact of the HydroxyMethylCytosine epigenetic signature on DNA structure and function (Completo, 2021)

FEDERICA BATTISTINI , PABLO D. DANS , MONTSERRAT TERRAZAS , CHIARA L. CASTELLAZZI , GUILLEM PORTELLA , MIREIA LABRADOR , NÚRIA VILLEGAS , ISABELLE BRUN-HEATH , CARLOS GONZÁLEZ , MODESTO OROZCO
PLoS Computational Biology, v.: 17 p.:9547 2021
Lugar de publicación: United states
E-ISSN: 15537358
DOI: [10.1371/journal.pcbi.1009547](https://doi.org/10.1371/journal.pcbi.1009547)
<http://dx.doi.org/10.1371/journal.pcbi.1009547>
Scopus®

Sequence-dependent structural properties of B-DNA: what have we learned in 40 years? (Completo, 2021)

GABRIELA DA ROSA , LEANDRO GRILLE , VICTORIA CALZADA , KATYA AHMAD , JUAN PABLO ARCON , FEDERICA BATTISTINI , GENÍS BAYARRI , THOMAS BISHOP , PAOLO CARLONI , THOMAS CHEATHAM III , ROSANA COLLEPARDO-GUEVARA , JACEK CZUB , JORGE R.

ESPINOSA , RODRIGO GALINDO-MURILLO , SARAH A. HARRIS , ADAM HOSPITAL , CHARLES LAUGHTON , JOHN H. MADDOCKS , AGNES NOY , MODESTO OROZCO , MARCO PASI , ALBERTO PÉREZ , DAIVA PETKEVICIUTE-GERLACH , RAHUL SHARMA , RAN SUN , PABLO D. DANS

Biophysical Reviews, 2021

Lugar de publicación: Germany

Escrito por invitación

ISSN: 18672450

E-ISSN: 18672469

DOI: [10.1007/s12551-021-00893-8](https://doi.org/10.1007/s12551-021-00893-8)

<http://dx.doi.org/10.1007/s12551-021-00893-8>

Scopus

Molecular Determinants for Nitric Oxide Regulation of the Murine Cationic Amino Acid Transporter CAT-2A (Completo, 2020)

PABLO D. DANS , RUIFANG ZHENG , GABRIELA DA ROSA , R. DANIEL PELUFFO

Biochemistry, v.: 59 p.:4225 - 4237, 2020

Lugar de publicación: United states

ISSN: 00062960

E-ISSN: 15204995

DOI: [10.1021/acs.biochem.0c00729](https://doi.org/10.1021/acs.biochem.0c00729)

<http://dx.doi.org/10.1021/acs.biochem.0c00729>

Scopus

A multi-modal coarse grained model of DNA flexibility mappable to the atomistic level (Completo, 2020)

JURGEN WALTHER , PABLO D. DANS , ALEXANDRA BALACEANU , ADAM HOSPITAL , GENIS BAYARRI , MODESTO OROZCO

Nucleic Acids Research, v.: 48 5 , p.:29 2020

Palabras clave: DNA flexibility coarse-grained simulations Monte Carlo

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica computacional

Medio de divulgación: Internet

Lugar de publicación: Oxford Academic

ISSN: 03051048

E-ISSN: 13624962

DOI: [10.1093/nar/gkaa015](https://doi.org/10.1093/nar/gkaa015)

<https://academic.oup.com/nar/article/48/5/e29/5709710>

Scopus

The static and dynamic structural heterogeneities of B-DNA: extending Calladine-Dickerson rules (Completo, 2019) Trabajo relevante

PABLO D. DANS , BALACEANU, A. , PASI, M. , Patelli, A. , PETKEVICIUTE, D. , WALTHER, J. , HOSPITAL, A. , BAYARRI, G. , LAVERY, R. , MADDOCKS, J. , OROZCO, M.

Nucleic Acids Research, v.: 47 p.:11090 - 11102, 2019

Palabras clave: estructura de ADN espacio conformacional movimientos acoplados dinamica y estructura del ADN reglas conformacionales

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica computacional

Medio de divulgación: Papel

Lugar de publicación: Oxford Academic

ISSN: 03051048

E-ISSN: 13624962

DOI: [10.1093/nar/gkz905](https://doi.org/10.1093/nar/gkz905)

<https://academic.oup.com/nar/article/47/21/11090/5590661>

WEB OF SCIENCE™ Scopus

Epigenetic loss of RNA-methyltransferase NSUN5 in glioma targets ribosomes to drive a stress adaptive translational program (Completo, 2019)

PABLO D. DANS

Acta Neuropathologica, p.:1 - 22, 2019

Areas de conocimiento:

Ciencias Médicas y de la Salud / Medicina Básica / Bioquímica y Biología Molecular /

Medio de divulgación: Internet

ISSN: 00016322
E-ISSN: 14320533
DOI: [10.1007/s00401-019-02062-4](https://doi.org/10.1007/s00401-019-02062-4)
WEB OF SCIENCE™ Scopus®

An in-depth look at DNA crystals through the prism of molecular dynamics simulations (Completo, 2019) Trabajo relevante

PABLO D. DANS
Chem, v.: 53, p.:649 - 663, 2019
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica computacional
Medio de divulgación: Internet
ISSN: 24519294
Scopus®

Modulation of the helical properties of DNA: next-to-nearest neighbour effects and beyond (Completo, 2019)

PABLO D. DANS
Nucleic Acids Research, v.: 479, p.:4418 - 4430, 2019
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica computacional
Medio de divulgación: Internet
ISSN: 03051048
E-ISSN: 13624962
DOI: [10.1093/nar/gkz255](https://doi.org/10.1093/nar/gkz255)
WEB OF SCIENCE™ Scopus®

VeriNA3d: an R package for nucleic acids data mining (Completo, 2019)

DARRÉ L., PABLO D. DANS
Bioinformatics, 2019
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Otros Tópicos Biológicos / Bioinformática
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Otros Tópicos Biológicos / Bioinformática
ISSN: 13674803
E-ISSN: 14602059
DOI: [10.1093/bioinformatics/btz553](https://doi.org/10.1093/bioinformatics/btz553)
WEB OF SCIENCE™ Scopus®

How B-DNA Dynamics Decipher Sequence-Selective Protein Recognition (Completo, 2019)

PABLO D. DANS
Journal of Molecular Biology, 2019
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica computacional
Medio de divulgación: Internet
ISSN: 00222836
E-ISSN: 10898638
DOI: [10.1016/j.jmb.2019.07.021](https://doi.org/10.1016/j.jmb.2019.07.021)
WEB OF SCIENCE™ Scopus®

Gene isolation and structural characterization of a legume tree defensin with a broad spectrum of antimicrobial activity (Completo, 2019)

RODRÍGUEZ-DECUADRO, S., PABLO D. DANS, CECCHETTO, G.
Planta, 2019
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Ciencias de las Plantas, Botánica /
ISSN: 00320935
E-ISSN: 14322048
DOI: [10.1007/s00425-019-03260-w](https://doi.org/10.1007/s00425-019-03260-w)
WEB OF SCIENCE™ Scopus®

Allosterism and signal transfer in DNA (Completo, 2018)

ALEXANDRA BALACEANU, ALBERTO PEREZ, PABLO D. DANS, MODESTO OROZCO
Nucleic Acids Research, v.: 4615, p.:7554 - 7565, 2018

Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica computacional
Medio de divulgación: Papel
Lugar de publicación: Oxford Academic
ISSN: 03051048
E-ISSN: 13624962
DOI: [10.1093/nar/gky549](https://doi.org/10.1093/nar/gky549)
WEB OF SCIENCE™ Scopus®

Antimicrobial and structural insights of a new snakin-like peptide isolated from *Peltophorum dubium* (Fabaceae) (Completo, 2018)

RODRÍGUEZ-DECUADRO, S., BARRACO-VEGA, M., PABLO D. DANS, VALESCA PANDOLFI, ANA MARIA BENKO-ISEPPON, CECCHETTO, G.
Amino Acids, v.: 50 9, p.:1245 - 1259, 2018
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Ciencias de las Plantas, Botánica /
Medio de divulgación: Internet
ISSN: 09394451
E-ISSN: 14382199
DOI: [10.1007/s00726-018-2598-3](https://doi.org/10.1007/s00726-018-2598-3)
WEB OF SCIENCE™ Scopus®

Glyceraldehyde-3-phosphate dehydrogenase is a chaperone that allocates labile heme in cells (Completo, 2018)

PABLO D. DANS, LUCIANA HANNIBAL
Journal of Biological Chemistry, v.: 293 37, p.:14557 - 14568, 2018
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular /
Medio de divulgación: Internet
ISSN: 00219258
E-ISSN: 1083351X
DOI: [10.1074/jbc.RA118.004169](https://doi.org/10.1074/jbc.RA118.004169)
WEB OF SCIENCE™ Scopus®

Modeling, simulations, and bioinformatics at the service of rna structure (Completo, 2018)

PABLO D. DANS, DARRÉ L.
Chem, v.: 5 1, p.:51 - 73, 2018
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica computacional
Medio de divulgación: Internet
Escrito por invitación
ISSN: 24519294
DOI: [10.1016/j.chempr.2018.09.015](https://doi.org/10.1016/j.chempr.2018.09.015)
Scopus®

How accurate are accurate force-fields for B-DNA? (Completo, 2017)

PABLO D. DANS, IVAN IVANI, ADAM HOSPITAL, GUILLEM PORTELLA, CARLOS GONZALEZ, MODESTO OROZCO
Nucleic Acids Research, v.: 45 7, p.:4217 - 4230, 2017
Palabras clave: Simulaciones de dinámica molecular Desarrollo de campos de fuerza Refinamiento de estructuras de RMN
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica computacional
Medio de divulgación: Papel
ISSN: 03051048
E-ISSN: 13624962
DOI: [10.1093/nar/gkw1355](https://doi.org/10.1093/nar/gkw1355)
<https://academic.oup.com/nar/article/45/7/4217/2907604>
WEB OF SCIENCE™ Scopus®

Saturation of recognition elements blocks evolution of new tRNA identities (Completo, 2016)

ASL, CB, PABLO D. DANS, AGT, EA
Science, v.: 2 2016

Palabras clave: Evolución Código genético ARN transferencia
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular /
Medio de divulgación: Internet
ISSN: 00368075
E-ISSN: 10959203
DOI: [10.1126/sciadv.1501860](https://doi.org/10.1126/sciadv.1501860)
<http://advances.sciencemag.org/content/2/4/e1501860.abstract>
WEB OF SCIENCE™ Scopus®

Long-timescale dynamics of the Drew-Dickerson dodecamer (Completo, 2016)

PABLO D. DANS , LD , II , TD , EA
Nucleic Acids Research, 2016
Palabras clave: Dinámica Molecular B-DNA
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica teórica
Medio de divulgación: Internet
ISSN: 03051048
E-ISSN: 13624962
DOI: [10.1093/nar/gkw264](https://doi.org/10.1093/nar/gkw264)
<https://nar.oxfordjournals.org/content/early/2016/04/15/nar.gkw264.full>
WEB OF SCIENCE™ Scopus®

Small Details Matter: the Importance of the 2-Hydroxyl in RNA (Completo, 2016)

L. DARRE , II , PABLO D. DANS , HG , AH , M. OROZCO
Journal of the American Chemical Society, 2016
Palabras clave: RNA conformation QM and QM/MM
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica teórica
Medio de divulgación: Papel
ISSN: 00027863
E-ISSN: 15205126
DOI: [10.1021/jacs.6b09471](https://doi.org/10.1021/jacs.6b09471)
WEB OF SCIENCE™ Scopus®

Multiscale simulation of DNA (Completo, 2016)

PABLO D. DANS , JW , HG , M. OROZCO
Current Opinion in Structural Biology, v.: 37 p.:29 - 45, 2016
Palabras clave: Estructura electronica Modelos atomísticos Modelos de grano grueso Modelos de cromatina
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica teórica
Medio de divulgación: Internet
Escrito por invitación
ISSN: 0959440X
DOI: [10.1016/j.sbi.2015.11.011](https://doi.org/10.1016/j.sbi.2015.11.011)
<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0959440X15001761>
Scopus®

The role of unconventional hydrogen bonds in determining BII propensities in B-DNA (Completo, 2016)

ALEXANDRA BALACEANU , MARCO PASI , PABLO D. DANS , AH , LAVERY, R , M. OROZCO
The Journal of Physical Chemistry Letters, 2016
Palabras clave: Molecular dynamics BI/BII equilibrium tetranucleotide level QM / AIM
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica teórica
Medio de divulgación: Papel
E-ISSN: 19487185
DOI: [10.1021/acs.jpcllett.6b02451](https://doi.org/10.1021/acs.jpcllett.6b02451)
WEB OF SCIENCE™ Scopus®

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

SS , PABLO D. DANS , LC , JM , OB

PLoS ONE, v.: 10 2015

Palabras clave: modelado GABA Prolina

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Internet

E-ISSN: 19326203

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

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

WEB OF SCIENCE™  Scopus

The structural impact of DNA mismatches (Completo, 2015)

GR, PABLO D. DANS, IGP, II, GG, M. OROZCO

Nucleic Acids Research, v.: 43 p.:4309 - 4321, 2015

Palabras clave: Dinámica Molecular NMR

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica teórica

Medio de divulgación: Internet

ISSN: 03051048

E-ISSN: 13624962

DOI: [10.1093/nar/gkv254](https://doi.org/10.1093/nar/gkv254)

<http://nar.oxfordjournals.org/content/43/8/4309.short>

WEB OF SCIENCE™  Scopus

BIGNASim: a NoSQL database structure and analysis portal for nucleic acids simulation data (Completo, 2015)

AH, PA, CC, LC, YB, PABLO D. DANS, EA

Nucleic Acids Research, v.: 44 2015

Palabras clave: Acidos nucleicos Dinámica Molecular Base de datos

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica teórica

Medio de divulgación: Internet

ISSN: 03051048

E-ISSN: 13624962

DOI: [10.1093/nar/gkv1301](https://doi.org/10.1093/nar/gkv1301)

<https://nar.oxfordjournals.org/content/44/D1/D272.full>

WEB OF SCIENCE™  Scopus

Parmbsc1: a refined force field for DNA simulations (Completo, 2015)

II, PABLO D. DANS, AN, A. PÉREZ, I. FAUSTINO, AH, EA

Nature Methods, v.: 13 p.:55 - 58, 2015

Palabras clave: Acidos nucleicos Dinámica Molecular Campos de fuerza

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica teórica

Medio de divulgación: Internet

ISSN: 15487091

E-ISSN: 15487105

DOI: [10.1038/nmeth.3658](https://doi.org/10.1038/nmeth.3658)

<http://www.nature.com/nmeth/journal/v13/n1/abs/nmeth.3658.html>

WEB OF SCIENCE™  Scopus

μABC: a systematic microsecond molecular dynamics study of tetranucleotide sequence effects in B-DNA (Completo, 2014)

MARCO PASI, JOHN H. MADDOCKS, DAVID BEVERIDGE, THOMAS C. BISHOP, DAVID A.

CASE, THOMAS CHEATHAM III, PABLO D. DANS

Nucleic Acids Research, 2014

Palabras clave: Molecular dynamics 136 tetranucleotides

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica teórica

Medio de divulgación: Internet

ISSN: 03051048

E-ISSN: 13624962

DOI: [10.1093/nar/gku855](https://doi.org/10.1093/nar/gku855)

<http://nar.oxfordjournals.org/content/early/2014/09/26/nar.gku855.short>

We present the results of microsecond molecular dynamics simulations carried out by the ABC group of laboratories on a set of B-DNA oligomers containing the 136 distinct tetranucleotide base sequences. We demonstrate that the resulting trajectories have extensively sampled the conformational space accessible to B-DNA at room temperature. We confirm that base sequence effects depend strongly not only on the specific base pair step, but also on the specific base pairs that flank each step. Beyond sequence effects on average helical parameters and conformational fluctuations, we also identify tetranucleotide sequences that oscillate between several distinct conformational substates. By analyzing the conformation of the phosphodiester backbones, it is possible to understand for which sequences these substates will arise, and what impact they will have on specific helical parameters.

WEB OF SCIENCE™ Scopus®

Direct measurement of the dielectric polarization properties of DNA (Completo, 2014) Trabajo relevante

ANA CUERVO, PABLO D. DANS, JOSÉ L. CARRASCOSA, M. OROZCO, GABRIEL GOMILA, LAURA FUMAGALLI

Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America, v.: 111 2014

Palabras clave: DNAligand binding DNA packaging atomic force microscopy atomistic simulations Poisson Boltzmann equation

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Internet

ISSN: 00278424

E-ISSN: 10916490

DOI: [10.1073/pnas.1405702111](https://doi.org/10.1073/pnas.1405702111)

<http://www.pnas.org/content/111/35/E3624.short>

The strength of DNA and DNA ligand electrostatic interactions crucially depends on the electric polarizability of DNA, represented by its dielectric constant. This has remained unknown owing to the lack of experimental techniques able to measure it. Here, we experimentally determined the dielectric constant of double-stranded DNA in a native condensed state inside a single bacteriophage as well as the dielectric constants of the protein shell and tail that compose the viral capsid using scanning force microscopy. We supported the experimental data by theoretically determining the DNA dielectric constant using atomistic simulations. Both approaches yield a dielectric constant of DNA around 8, sensibly higher than commonly assumed, thus revealing a DNA intrinsic property essential for realistic computational description of DNA.

WEB OF SCIENCE™ Scopus®

Unraveling the sequence-dependent polymorphic behavior of d(CpG) steps in B-DNA (Completo, 2014)

PABLO D. DANS, I. FAUSTINO, F. BATTISTINI, KRYSZYNA ZAKRZEWSKA, LAVERY, R., M. OROZCO

Nucleic Acids Research, v.: 42 p.:11304 - 11320, 2014

Palabras clave: Molecular dynamics BI/BII curves+/canion

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica teórica

Medio de divulgación: Internet

ISSN: 03051048

E-ISSN: 13624962

DOI: [10.1093/nar/gku809](https://doi.org/10.1093/nar/gku809)

<http://nar.oxfordjournals.org/content/42/18/11304.full?sid=078ec490-0835-415e-a0f6-46cdf6779bf4>

We have made a detailed study of one of the most surprising sources of polymorphism in B-DNA: the high twist/low twist (HT/LT) conformational change in the d(CpG) base pair step. Using extensive computations, complemented with database analysis, we were able to characterize the twist polymorphism in the d(CpG) step in all the possible tetranucleotide environment. We found that twist polymorphism is coupled with BI/BII transitions, and, quite surprisingly, with slide polymorphism in the neighboring step. Unexpectedly, the penetration of cations into the minor groove of the d(CpG) step seems to be the key element in promoting twist transitions. The tetranucleotide environment also plays an important role in the sequence-dependent d(CpG) polymorphism. In this connection, we have detected a previously unexplored intramolecular C-H...O hydrogen bond interaction that stabilizes the low twist state when 3'-purines flank the d(CpG) step. This work explains a coupled mechanism involving several apparently uncorrelated conformational transitions that has only been partially inferred by earlier experimental or theoretical studies. Our results provide a complete description of twist polymorphism in d(CpG) steps and a detailed picture of the molecular choreography associated with this conformational

change.

WEB OF SCIENCE™ Scopus®

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

PABLO D. DANS , L. DARRE , MACHADO, M. , ZEIDA, A. , A. BRANDNER , PANTANO, S
Lecture Notes in Computer Science, v.: 8213 p.:71 - 81, 2013

Palabras clave: Molecular dynamics nucleic acids coarse-grain force field

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Simulaciones Biomoleculares

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 03029743

E-ISSN: 16113349

DOI: [10.1007/978-3-319-02624-4_7](https://doi.org/10.1007/978-3-319-02624-4_7)

http://link.springer.com/chapter/10.1007/978-3-319-02624-4_7

Scopus®

Exploring polymorphisms in B-DNA helical conformations (Completo, 2012)

PABLO D. DANS , A. PÉREZ , I. FAUSTINO , LAVERY, R , M. OROZCO

Nucleic Acids Research, v.: 41 2012

Palabras clave: Molecular dynamics X-ray conformational space Bayesian statistic Normality / Binormality Unimodal / bimodal

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 03051048

E-ISSN: 13624962

DOI: [10.1093/nar/gks884](https://doi.org/10.1093/nar/gks884)

<http://nar.oxfordjournals.org/content/early/2012/09/24/nar.gks884.abstract?sid=cb82b3d0-19fd-443e-a3>

WEB OF SCIENCE™ Scopus®

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

ZEIDA, A. , MACHADO, M. R. , PABLO D. DANS , PANTANO, S

Physical Review E, v.: 86 p.:21903 2012

Palabras clave: Molecular dynamics nucleic acids Coarse-grained force field

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica teórica

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 15393755

E-ISSN: 15502376

DOI: [10.1103/PhysRevE.86.021903](https://doi.org/10.1103/PhysRevE.86.021903)

<http://pre.aps.org/abstract/PRE/v86/i2/e021903>

WEB OF SCIENCE™ Scopus®

Switching Reversibility to Irreversibility in Glycogen Synthase Kinase 3 Inhibitors: Clues for Specific Design of New Compounds (Completo, 2011)

D. I. PÉREZ , V. PALOMO , C. PÉREZ , C. GIL , PABLO D. DANS , F. J. LUQUE , S. CONDE , A. MARTÍNEZ

Journal of Medicinal Chemistry, 2011

Palabras clave: central nervous system Alzheimers disease Docking Design of inhibitors

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Diseño experimental e in silico de fármacos

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 00222623

E-ISSN: 15204804

DOI: [10.1021/jm1016279](https://doi.org/10.1021/jm1016279)

[http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/jm1016279?](http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/jm1016279?prevSearch=%255Bauthor%253A%2BDans%252C%2BP.%2BD.%255D)

[prevSearch=%255Bauthor%253A%2BDans%252C%2BP.%2BD.%255D](http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/jm1016279?prevSearch=%255Bauthor%253A%2BDans%252C%2BP.%2BD.%255D)

WEB OF SCIENCE™ Scopus®

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

MACHADO, M. R. , PABLO D. DANS , PANTANO, S
Physical Chemistry Chemical Physics, v.: 13 p.:18134 - 18144, 2011
Palabras clave: Molecular dynamics nucleic acids multiscale modelling
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica teórica
Medio de divulgación: Papel
ISSN: 14639076
E-ISSN: 14639084
DOI: [10.1039/c1cp21248f](https://doi.org/10.1039/c1cp21248f)
<http://pubs.rsc.org/en/Content/ArticleLanding/2011/CP/c1cp21248f>
WEB OF SCIENCE™ Scopus®

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

L. DARRE , MACHADO, M. R. , PABLO D. DANS , F. E. HERRERA , PANTANO, S
Journal of Chemical Theory and Computation, 2010
Palabras clave: 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
ISSN: 15499618
E-ISSN: 15499626
DOI: [10.1021/ct100379f](https://doi.org/10.1021/ct100379f)
<http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/ct100379f?prevSearch=%2528Darr%25C3%25A9%252CL.%2529%2BNOT%2B%25>
WEB OF SCIENCE™ Scopus®

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

PABLO D. DANS , ZEIDA, A. , MACHADO, M. , PANTANO, S
Journal of Chemical Theory and Computation, v.: 6 p.:1711 - 1725, 2010
Palabras clave: Acidos nucleicos Coarse-grain Dinámica Molecular
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica/Bioinformática
Medio de divulgación: Papel
ISSN: 15499618
E-ISSN: 15499626
DOI: [10.1021/ct900653p](https://doi.org/10.1021/ct900653p)
<http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/ct900653p?prevSearch=%255Bauthor%253A%2BDans%252C%2BP.%2BD.%255D>
Coarse-grain (CG) techniques allow considerable extension of the accessible size and time scales in simulations of biological systems. Although many CG representations are available for the most common biomacromolecules, very few have been reported for nucleic acids. Here, we present a CG model for molecular dynamics simulations of DNA on the multi-microsecond time scale. Our model maps the complexity of each nucleotide onto six effective superatoms keeping the chemical sense of specific Watson–Crick recognition. Molecular interactions are evaluated using a classical Hamiltonian with explicit electrostatics calculated under the framework of the generalized Born approach. This CG representation is able to accurately reproduce experimental structures, breathing dynamics, and conformational transitions from the A to the B form in double helical fragments. The model achieves a good qualitative reproduction of temperature-driven melting and its dependence on size, ionic strength, and sequence specificity. Reconstruction of atomistic models from CG trajectories give remarkable agreement with structural, dynamic, and energetic features obtained from fully atomistic simulation, opening the possibility to acquire nearly atomic detail data from CG trajectories.
WEB OF SCIENCE™ Scopus®

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

PABLO D. DANS , E. LAURA COITIÑO
Journal of Chemical Information and Modeling, v.: 49 6 , p.:1407 - 1419, 2009
Palabras clave: Datamining sobre propiedades moleculares DFT conceptual Antitumorales con Pt(II) y Pd(II)
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica / Química Computacional y Datamining

Medio de divulgación: Papel

Lugar de publicación: American Chemical Society

ISSN: 15499596

E-ISSN: 1549960X

<http://pubs.acs.org/doi/pdf/10.1021/ci800421w>

Quantum and nonquantum descriptors clearly related to physicochemical features and predictors of the trends to evolve along different stages of a known mechanism of action were determined for a set of square-planar compounds of general formula [MIIA1A2L1L2] (MII = Pt(II)/Pd(II); Ai/Li = carrier/labile ligands), structurally related to the anticancer agent Cisplatin. Selected compounds have been sorted and classified by Wards Cluster Analysis and Principal Components Analysis data-mining techniques using seventeen 1D and two 3D of such theoretical descriptors calculated at the DFT level (PCM-B3LYP/LANL2DZ/6-31G*). A rationale emerging from the study is that whereas most significant differences come from substitution of Cisplatin ligands, cis/trans isomerism, and exchange of MII introduce minor alterations in the electronic/geometrical structure. This provides theoretical support to the assay of transplatinum compounds as potential anticancer drugs, a fact already pointed out by empirical evidence. Similarly, the little geometrical/electronic differences triggered by switching MII from Pt to Pd enable us to devise a rational path to propose new compounds with expected good anticancer profiles, tuning alterations introduced by simultaneously changing both metal and ligands. Current results serve thus to enlarge the Cleare-Hoeschele guides for Pt(II) square-planar anticancer potential drugs to Pd(II) compounds, both using cis/trans scaffolds.

WEB OF SCIENCE™ Scopus'

Isoform-specific determinants in the HP1 binding to histone 3: insights from molecular simulations (Completo, 2009)

MACHADO, M. , PABLO D. DANS , PANTANO, S

Amino Acids, v.: 38 p.:1571 - 1581, 2009

Palabras clave: Epigenetics HIV-1 Transcription Phosphorylation and methylation

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Simulaciones Biomoleculares

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 09394451

E-ISSN: 14382199

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

WEB OF SCIENCE™ Scopus'

Subcellular localization of the interaction between the human immunodeficiency virus transactivator Tat and the nucleosome assembly protein 1 (Completo, 2009)

Trabajo relevante

DE MARCO, A. , PABLO D. DANS , KNEZEVICH, A. , MAIURI, P. , PANTANO, S, MARCELLO, A.

Amino Acids, v.: 38 p.:1583 - 1593, 2009

Palabras clave: HIV Chromatin hNAP-1 FRET Protein interaction

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Virología / Virología molecular, interacción proteína-proteína, docking.

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 09394451

E-ISSN: 14382199

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

WEB OF SCIENCE™ Scopus'

Structural and energetic study of Cisplatin and derivatives: comparison of the performance of Density Functional Theory implementations (Completo, 2008)

Trabajo relevante

PABLO D. DANS , CRESPO, A. , DARÍO A. ESTRIN , E. LAURA COITIÑO

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

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

Lugar de publicación: American Chemical Society

ISSN: 15499618

E-ISSN: 15499626

<http://pubs.acs.org/doi/pdf/10.1021/ct7002385>

In this work, we compare the performance of different DFT implementations, using analytical and

numerical basis sets for the expansion of the atomic wave function, in determining structural and energetic parameters of Cisplatin and some biorelevant derivatives. Characterization of the platinum-containing species was achieved at the HF, MP2, and DFT (PBE1PBE, mPW1PW91, B3LYP, B3PW91, and B3P86) levels of theory, using two relativistic effective core potentials to treat the Pt atom (LanL2DZ and SBK), together with analytical Gaussian-type basis sets as implemented in Gaussian03. These results were compared with those obtained with the SIESTA code that employs a pseudopotential derived from the Troullier–Martins procedure for the Pt atom and numerical pseudoatomic orbitals as basis set. All modeled properties were also compared with the experimental values when available or to the best theoretical calculations known to date. On the basis of the results, SIESTA is an excellent alternative to determine structure and energetics of platinum complexes derived from Cisplatin, with less computational efforts. This validates the use of the SIESTA code for this type of chemical systems and thus provides a computationally efficient quantum method (capable of linear scaling at large sizes and available in QM/MM implementations) for exploring larger and more complex chemical models which shall reproduce more faithfully the real chemistry of Cisplatin in physiological conditions.

WEB OF SCIENCE™ Scopus®

NO ARBITRADOS

A fijivirus major viroplasm protein shows RNA-stimulated ATPase activity by adopting pentameric and hexameric assemblies of dimers (Completo, 2022)

GABRIELA LLAUGER, ROBERTO MELERO, DAMIAN MONTI, GABRIELA SYCZ, CRISTIAN HUCK-IRIART, MARIA CERUTTI, SEBASTIAN KLINKE, EVELYN MIKKELSEN, Tijman, A., PABLO D. DANS, MARIANA DEL VAS, LISANDRO OTERO

BioRxiv, p.:1 - 45, 2022

ISSN: CCBCCB

DOI: [10.1101/2022.04.16.488468](https://doi.org/10.1101/2022.04.16.488468)

<https://www.biorxiv.org/content/10.1101/2022.04.16.488468v1.abstract>

B-DNA polymorphisms at the base pair step level (Resumen, 2012)

PABLO D. DANS

FEBS Journal, v.: 279 p.:529 - 529, 2012

Palabras clave: Molecular dynamics X-ray conformational space Helical conformations Binormality and bimodality

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 1742464X

E-ISSN: 17424658

ARTÍCULOS ACEPTADOS

ARBITRADOS

Aptamers Meet Structural Bioinformatics, Computational Chemistry and Artificial Intelligence (Completo, 2025)

PABLO D. DANS, Gabriela da Rosa, Mauro de Castro, Víctor Miguel García Velásquez, Santiago Pintos, Jimena Benedetto, Leandro Grile, Sofia Valla, Luis Marat Álvarez Salas, Victoria Calzada

Wiley Interdisciplinary Reviews Computational Molecular Science, 2025

Medio de divulgación: Internet

Escrito por invitación

Fecha de aceptación: 15/07/2025

E-ISSN: 17590884

LIBROS

Computational Tools for Chemical Biology (Participación, 2017)

HANSEL GOMEZ, JURGEN WALTHER, DARRÉ L., IVAN IVANI, PABLO D. DANS, MODESTO OROZCO Publicado

Editor/Compilador: Sonsoles Martín-Santamaría
Edición: Sonsoles Martín-Santamaría
Editorial: Royal Society of Chemistry , UK
Tipo de publicación: Investigación
DOI: [10.1039/9781788010139-00165](https://doi.org/10.1039/9781788010139-00165)
Referado
Escrito por invitación
Palabras clave: Modelado molecular ADN / ARN Simulaciones Mecanica cuantica Mecanica Clasica
Metodos de grano grueso Modelos mesoscópicos
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Biología computacional, biofísica teórica, bioinformática estructural y química
teórica
Medio de divulgación: Papel
ISSN/ISBN: 978-1-78262-700-5
Financiación/Cooperación:
Institute for Research in Biomedicine / Remuneración, España
<http://pubs.rsc.org/-/content/chapter/bk9781782627005-00165/978-1-78801-013-9>

Capítulos:
Molecular Modelling of Nucleic Acids
Página inicial 165, Página final 197

Primer foro de innovaciones educativas en la enseñanza de grado (Participación , 2002)

E. LAURA COITIÑO , PABLO D. DANS , VASQUEZ, S. , CASTRO, A Publicado

Editor/Compilador: Comisión Sectorial de Enseñanza - Universidad de la República
Editorial: Comisión Sectorial de Enseñanza , Montevideo
Tipo de publicación: Investigación
Palabras clave: Enseñanza de la Físicoquímica moderna Facultad de Ciencias - UDELAR
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Enseñanza de la Físicoquímica
Medio de divulgación: Papel
ISSN/ISBN: 9974001900
Financiación/Cooperación:
Institución del exterior / Apoyo financiero,

Capítulos:
Enseñanza de la fisicoquímica a nivel molecular en el currículum de la Licenciatura en Bioquímica:
Resultados de 5 años de exploración educativa
Página inicial 164, Página final 172

PUBLICACIÓN DE TRABAJOS PRESENTADOS EN EVENTOS

Linking chromatin structure, chromosome conformation, and gene regulation (2019)

PABLO D. DANS
Publicado
Resumen
Evento: Local
Descripción: Barcelona BioMed Seminars: Research Node's Seminar
Ciudad: Barcelona
Año del evento: 2019
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica computacional

Linking chromatin structure, chromosome conformation, and gene regulation (2019)

PABLO D. DANS , NEGUEMBOR, M.V. , BUITRAGO, B. , WALTHER, J. , MARIMON ROMERO, P. ,
BRUN-HEATH, I. , COSMA, P. , OROZCO, M.
Publicado
Resumen
Evento: Internacional

Descripción: Biophysical Society Thematic Meetings - Multiscale Modeling of Chromatin: Bridging Experiment with Theory
Ciudad: Les Houches
Año del evento: 2019
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica computacional
Medio de divulgación: Internet

From Optical Microscopy and Genome-Wide Analysis to Near Atomic Resolution of Human Genes (2019)

PABLO D. DANS , NEGUEMBOR, M.V. , BUITRAGO, B. , WALTHER, J. , LEMA, R. , MARIMON ROMERO, P. , BRUN-HEATH, I. , COSMA, P. , OROZCO, M.

Publicado

Resumen

Evento: Internacional

Descripción: Biophysical Society of Canada ? Annual Meeting

Ciudad: Toronto

Año del evento: 2019

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica computacional

Medio de divulgación: Internet

Correlation between chromatin structure, chromosome conformation, and gene regulation (2019)

BUITRAGO, D. , NEGUEMBOR, M.V. , WALTHER, J. , ARCON, J. P. , PABLO D. DANS , BRUN-HEATH, I. , LEMA, R. , COSMA, P. , OROZCO, M.

Publicado

Resumen

Evento: Internacional

Descripción: EMBO Workshop: The genome in three dimensions

Ciudad: Kyllini

Año del evento: 2019

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica computacional

Medio de divulgación: Internet

Structural Bioinformatics meets Nucleic Acids: Models, databases, tools and applications (2019)

PABLO D. DANS

Publicado

Resumen

Evento: Internacional

Descripción: X International Conference on Bioinformatics ? Iberoamerican Society of Bioinformatics

Ciudad: Montevideo

Año del evento: 2019

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica computacional

Medio de divulgación: Internet

Structural Characterization of the oxidizing power of Mn-Peroxidases (2019)

da ROSA, G. , Guallar, V. , CECCHETTO, G. , PABLO D. DANS

Publicado

Resumen

Evento: Internacional

Descripción: X International Conference on Bioinformatics ? Iberoamerican Society of Bioinformatics

Ciudad: Montevideo

Año del evento: 2019

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica computacional

Medio de divulgación: Internet

La primavera de 1953: La entrada en escena de la doble hebra de ADN (2019)

PABLO D. DANS

Publicado
Resumen
Evento: Nacional
Descripción: Programa Hacer ConCiencia (ANTEL - PEDECIBA)
Ciudad: Montevideo
Año del evento: 2019
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Otros Tópicos Biológicos /
Medio de divulgación: Internet
https://www.antel.com.uy/web/innova/innovacion/-/asset_publisher/zn28gH7fD27k/content/hacer-concienc

DNA Structure and Dynamics: Two Successful Stories using HPC (2019)

PABLO D. DANS
Publicado
Resumen
Descripción: EuroHPC Summit Week 2019
Ciudad: Poznan
Año del evento: 2019
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica computacional

Revealing Human Genes 3D Structural Reorganization during Differentiation/Reprogramming at near Atomic Resolution (2019)

PABLO D. DANS
Publicado
Resumen
Evento: Internacional
Descripción: 4th Protein Biophysics at the end of the world
Ciudad: Montevideo
Año del evento: 2019
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica computacional
Medio de divulgación: Internet

GenStorm: an integrated approach to visualize and model the spatial conformation of genes at the nanoscale level (2018)

NEGUEMBOR, M.V. , PABLO D. DANS , RICCI, M. A. , BIUTRAGO, D. , WALTHER, J. , BRUN-HEATH, I. , COSMA, P. , OROZCO, M.
Publicado
Resumen
Evento: Internacional
Descripción: CECAM-Lorentz Joint Workshop: Multiscale-modelling of nucleosomes and their positioning on DNA
Ciudad: Lausanne
Año del evento: 2018
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica computacional
Medio de divulgación: Internet

A chromatin multi-scale model: from atomistic to coarse-grained and back (2018)

WALTHER, J. , PABLO D. DANS , BATTISTINI, F. , TIESSLER, L. , OROZCO, M.
Publicado
Resumen
Evento: Internacional
Descripción: CECAM-Lorentz Joint Workshop: Multiscale-modelling of nucleosomes and their positioning on DNA
Ciudad: Lausanne
Año del evento: 2018
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica computacional
Medio de divulgación: Internet

Visualizing and modeling the spatial conformation of genes and chromosomes at the nanoscale level

(2018)

PABLO D. DANS , NEGUEMBOR, M.V. , RICCI, M. A. , BIUTRAGO, D. , WALTHER, J. , BRUN-HEATH, I. , COSMA, P. , OROZCO, M.

Publicado

Resumen

Evento: Internacional

Descripción: CECAM Workshop: Epigenetics and Multiscale Genomics

Ciudad: Lausanne

Año del evento: 2018

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica computacional

Medio de divulgación: Internet

Understanding the link between chromatin structure, chromosome conformation, and gene regulation

(2018)

BIUTRAGO, D. , PABLO D. DANS , LEMA, R. , NEGUEMBOR, M. V. , BRUN-HEATH, I. , COSMA, P. , OROZCO, M.

Publicado

Resumen

Evento: Internacional

Descripción: CECAM Workshop: Epigenetics and Multiscale Genomics

Ciudad: Lausanne

Año del evento: 2018

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica computacional

Medio de divulgación: Internet

B-DNA Structural Polymorphisms Explain the Sequence Preferences of Small Intercalators (2018)

PABLO D. DANS , OROZCO, M.

Publicado

Resumen

Evento: Internacional

Descripción: ISQBP President's Meeting

Ciudad: Barcelona

Año del evento: 2018

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica computacional

Medio de divulgación: Internet

Integrating high-resolution optical microscopy and coarse-grained models of chromosome segments

(2018)

MARIMON ROMERO, P. , NEGUEMBOR, M. V. , BIUTRAGO, D. , PABLO D. DANS , WALTHER, J. , BRUN-HEATH, I. , LEMA, R. , COSMA, P. , OROZCO, M.

Publicado

Resumen

Evento: Nacional

Descripción: Jornadas de Bioinformática i Genómica

Ciudad: Barcelona

Año del evento: 2018

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica computacional

Medio de divulgación: Internet

A multiscale model of chromatin at bp-level (2017)

WALTHER, J. , PABLO D. DANS , OROZCO, M.

Publicado

Resumen

Evento: Internacional

Descripción: CECAM workshop ?Challenges across Large-Scale Biomolecular and Polymer Simulations

Ciudad: Viena

Año del evento: 2017

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica computacional
Medio de divulgación: Internet

Understanding the molecular basis of damaged DNA recognition by the protein MutS (2017)

GARCIA, O. , PABLO D. DANS , OROZCO, M.

Publicado

Resumen

Evento: Nacional

Descripción: XVI congreso de la Sociedad Biofísica de España

Ciudad: Sevilla

Año del evento: 2017

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica computacional

Medio de divulgación: Internet

Deciphering the conformational code behind the indirect readout of DNA sequences (2017)

PABLO D. DANS , OROZCO, M.

Publicado

Resumen

Evento: Nacional

Descripción: XVI congreso de la Sociedad Biofísica de España

Ciudad: Sevilla

Año del evento: 2017

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica computacional

Medio de divulgación: Internet

The physical basis of allostery and signal transfer in DNA (2017)

BALACEANU, A. , PABLO D. DANS , OROZCO, M.

Publicado

Resumen

Evento: Internacional

Descripción: Royal Society Conference: Allostery and Molecular Machines

Ciudad: Londres

Año del evento: 2017

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica computacional

Medio de divulgación: Internet

CyberRNAting: A web application to assess RNA 3D structure peculiarities (2017)

GALLEGO, D. , BAYARRI, G. , HOSPITAL, A. , PABLO D. DANS , OROZCO, M.

Publicado

Resumen

Evento: Nacional

Descripción: XI RANN

Ciudad: Madrid

Año del evento: 2017

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica computacional

Medio de divulgación: Internet

A Montecarlo model to assess chromatin conformation (2017)

WALTHER, J. , PABLO D. DANS , OROZCO, M.

Publicado

Resumen

Evento: Internacional

Descripción: EMBO Conference: Nuclear Structure and Dynamics

Ciudad: L'Ille sur la Sorgue

Año del evento: 2017

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica computacional

Medio de divulgación: Internet

Expanding the boundaries of DNA crystal simulations (2017)

PABLO D. DANS

Publicado

Resumen

Evento: Nacional

Descripción: 11th RES Users' Meeting & 6th HPC Advisory Council Conference

Ciudad: Santiago de Compostela

Año del evento: 2017

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica computacional

Medio de divulgación: Internet

Looking at RNA through ?/? glasses (2016)

GALLEGO, D. , DARRÉ L. , PABLO D. DANS , OROZCO, M.

Publicado

Resumen

Descripción: RNA Structure, Dynamics and Function

Ciudad: Trieste

Año del evento: 2016

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica computacional

Medio de divulgación: Internet

t-RNAsaurus rex and the frozen genetic code (2016)

PABLO D. DANS

Publicado

Resumen

Evento: Nacional

Descripción: VII Reunión de la Red Temática Española de RNA

Ciudad: Madrid

Año del evento: 2016

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica computacional

Medio de divulgación: Internet

Ribose2'-hydroxyl group orientation in RNA: How well do force fields perform (2016)

DARRÉ L. , IVANI, I. , PABLO D. DANS , GOMEZ, H. , GALLEGO, D. , BATTISTINI, F. , OROZCO, M.

Publicado

Resumen

Evento: Nacional

Descripción: XXXII annual meeting of reference network of R+D+I on theoretical and computational chemistry

Ciudad: Cerdanyola del Vallès

Año del evento: 2016

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica computacional

Medio de divulgación: Internet

Revisiting the ribose 2'-hydroxyl group orientation in RNA: insights from the Protein Data Bank and molecular simulations (2016)

DARRÉ L. , IVANI, I. , PABLO D. DANS , GOMEZ, H. , GALLEGO, D. , BATTISTINI, F. , OROZCO, M.

Publicado

Resumen

Evento: Nacional

Descripción: VII Reunión de la Red Temática Española de RNA

Ciudad: Madrid

Año del evento: 2016

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica computacional

Medio de divulgación: Internet

Simulation of chromatin structure from epigenetic domains (2016)

BUITRAGO, D. , PABLO D. DANS , OROZCO, M.

Publicado
Resumen
Evento: Internacional
Descripción: Conference on Genome Architecture in Space and Time
Ciudad: Trieste
Año del evento: 2016
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica computacional

A coarse-grained model to study chromatin in 3D (2016)

WALTHER, J. , PABLO D. DANS , OROZCO, M.
Publicado
Resumen
Evento: Internacional
Descripción: Dynamics of Genome Structure: 4D Genome ERC Synergy Project
Ciudad: Barcelona
Año del evento: 2016
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica computacional

Modeling chromatin organization based on epigenetic modifications (2016)

PABLO D. DANS , BUITRAGO, D. , OROZCO, M.
Publicado
Resumen
Evento: Nacional
Descripción: 1st Biomed PhD Day Symposium
Ciudad: Barcelona
Año del evento: 2016
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica computacional
Medio de divulgación: Internet

A Talk with Siméon, Ludwig and Doofenshirtz: Direct Measurement of the Dielectric Polarization Properties of DNA (2016)

PABLO D. DANS
Publicado
Resumen
Evento: Regional
Descripción: 1er Workshop Latinoamericano de Modelado Molecular y Simulación Computacional
Ciudad: Buenos Aires
Año del evento: 2016
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica computacional
Medio de divulgación: Internet
<https://workshopsimulacion.wordpress.com/>

A Talk with Siméon and Ludwig: Direct Measurement of the Dielectric Polarization Properties of DNA (2015)

PABLO D. DANS
Publicado
Resumen
Evento: Internacional
Descripción: X Meeting on Nucleic Acids and Nucleosides (X RANN)
Ciudad: Barcelona
Año del evento: 2015
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica computacional
Medio de divulgación: Internet

Breaking down DNA allostery: A protein-DNA binding computational study (2015)

BALACEANU, A. , PABLO D. DANS , OROZCO, M.
Publicado
Resumen

Evento: Internacional
Descripción: FEBS-EMBO Conference
Ciudad: Paris
Año del evento: 2015
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica computacional
Medio de divulgación: Internet

Towards multiscale investigation of base-pair level properties of chromatin (2015)

PABLO D. DANS , WALTHER, J. , OROZCO, M.
Publicado
Resumen
Evento: Internacional
Descripción: New Trends in Computational Chemistry for Industry Applications
Ciudad: Barcelona
Año del evento: 2015
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica computacional
Medio de divulgación: Internet

A Montecarlo model to sample B-DNA conformations efficiently (2015)

WALTHER, J. , PABLO D. DANS , OROZCO, M.
Publicado
Resumen
Evento: Internacional
Descripción: EMBO Conference: Nuclear Structure and Dynamics
Ciudad: L'Ille sur la Sorgue
Año del evento: 2015
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica computacional
Medio de divulgación: Internet

t-RNAsaurus rex and the freezing of the genetic code (2015)

PABLO D. DANS
Publicado
Resumen
Evento: Nacional
Descripción: III Jornadas de Bioinformática y Biología Computacional
Ciudad: Barcelona
Año del evento: 2015
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica computacional
Medio de divulgación: Internet

Unraveling the sequence-dependent polymorphic behavior of CpG steps in B-DNA (2014)

PABLO D. DANS , FAUSTINO, I. , BATTISTINI, F. , ZAKRZEWSKA, K. , LAVERY, R. , OROZCO, M.
Publicado
Resumen
Evento: Internacional
Descripción: meeting annual del Ascona B-DNA Consortium
Ciudad: Barcelona
Año del evento: 2014
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica computacional
Medio de divulgación: Internet
Financiación/Cooperación:
Instituto de Investigación Biomedica Barcelona / Apoyo financiero, España

A talk with Siméon and Ludwig: Direct measurement of the dielectric properties of DNA (2014)

PABLO D. DANS
Publicado
Resumen
Evento: Local

Descripción: 1st IRB Barcelona Postdoc Day
Ciudad: Barcelona
Año del evento: 2014
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica computacional
Medio de divulgación: Internet

The origins of cooperativity in Protein-DNA binding: A computational study (2014)

BALACEANU, A. , PABLO D. DANS , OROZCO, M.
Publicado
Resumen
Evento: Internacional
Descripción: CECAM Workshop Modeling cellular life: From single molecules to cellular function
Ciudad: Lausanne
Año del evento: 2014
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica computacional
Medio de divulgación: Internet
Financiación/Cooperación:
Instituto de Investigación Biomedica Barcelona / Apoyo financiero, España

EPIGENETIC MODIFICATIONS: THE TICK MARKS OF THE CLOCK OF LIFE? Moving from CpG and methyl-CpG to hydroxymethyl-CpG (2013)

F. BATTISTINI , PABLO D. DANS , M. OROZCO
Publicado
Resumen
Evento: Internacional
Descripción: The clock of life
Ciudad: Barcelona
Año del evento: 2013
Palabras clave: DNA mechanical properties MD simulations Mesoscopic model Nucleosome formation prediction
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Físicoquímica teórica
Medio de divulgación: Papel
<http://mmb.irbbarcelona.org/irbphdsymposium/index.php/home.html>

Exploring polymorphisms in B-DNA helical conformations (2012)

PABLO D. DANS , A. PÉREZ , I. FAUSTINO , LAVERY, R. , M. OROZCO
Publicado
Resumen
Evento: Regional
Descripción: XXVIII Reunió Anual de la Xarxa de Referència de R+D+i en Química Teòrica i Computacional
Ciudad: Barcelona
Año del evento: 2012
Palabras clave: Molecular dynamics X-ray conformational space
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica /
Medio de divulgación: Papel
<http://www.xrqtc.com/index.php/ca/xxvii-portada>

B-DNA polymorphisms at the base pair step level (2012)

I. FAUSTINO , PABLO D. DANS , A. PÉREZ , M. OROZCO
Publicado
Resumen
Evento: Internacional
Descripción: Bio-NMR
Ciudad: Barcelona
Año del evento: 2012
Página inicial: 24
Página final: 24
Palabras clave: Molecular dynamics X-ray conformational space Normality / Binormality

Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica /
Medio de divulgación: Papel
<http://mmb.irbbarcelona.org/BioNMR2012/regist.htm>

Model selection using Bayesian statistics in structural and computational biology (2012)

PABLO D. DANS , M. OROZCO
Publicado
Resumen
Evento: Internacional
Descripción: Bayesian methods in biostatistics and bioinformatics
Ciudad: Barcelona
Año del evento: 2012
Palabras clave: Helical conformations Bayesian methods structural databases MD simulations
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Matemáticas / Estadística y Probabilidad / Bioestadística y bioinformática
Medio de divulgación: Papel
<http://www.irbbarcelona.org/index.php/en/events/barcelona-bioconferences/past/bayesian-methods-in-bi>

Bimodality in B-DNA Helical Parameters: Reality or Force-Field Artifact? (2011)

PABLO D. DANS , M. OROZCO
Publicado
Resumen
Evento: Internacional
Descripción: Coarse-Grain Mechanics of DNA: Part II From Electrons to Oligomers
Ciudad: Lausanne
Año del evento: 2011
Página inicial: 15
Página final: 15
Palabras clave: Molecular dynamics X-ray conformational space
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica /
Medio de divulgación: Papel
<http://www.cecam.org/workshop-539.html>

Breathing, bubbling, bending (and binding?): DNA flexibility from multimicrosecond simulations (2011)

ZEIDA, A. , MACHADO, M. R. , PABLO D. DANS , PANTANO, S
Publicado
Resumen
Evento: Internacional
Descripción: Coarse-Grain Mechanics of DNA: Part II From Electrons to Oligomers
Ciudad: Lausanne
Año del evento: 2011
Página inicial: 14
Página final: 14
Palabras clave: Molecular dynamics Coarse-grained force field
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica /
Medio de divulgación: Papel
<http://www.cecam.org/workshop-539.html>

Ion-induced DNA conformational changes explored in the microsecond time scale by coarse-grain molecular dynamics simulations (2011)

L. DARRE , PABLO D. DANS , PANTANO, S
Publicado
Resumen
Evento: Regional
Descripción: 2do congreso de la asociación argentina de bioinformática y biología computacional
Ciudad: Córdoba, Argentina
Año del evento: 2011
Palabras clave: Acidos nucleicos Simulaciones coarse-grain DNA bending
Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica computacional
Medio de divulgación: Internet
<http://a2b2c.org.ar/cordoba-2011.html>

Plug and play model to perform multiscale simulations with DNA (2011)

MACHADO, M. , PABLO D. DANS , PANTANO, S
Publicado
Resumen
Evento: Regional
Descripción: 2do congreso de la asociación argentina de bioinformática y biología computacional
Ciudad: Córdoba, Argentina
Año del evento: 2011
Palabras clave: Simulaciones atomísticas Simulaciones coarse-grain
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica computacional
Medio de divulgación: Internet
<http://a2b2c.org.ar/cordoba-2011.html>

Coarse-Grain Model for Nucleic acids at nearly atomistic resolution (2010)

PABLO D. DANS , PANTANO S
Publicado
Resumen
Evento: Internacional
Descripción: Internacional Computational Modelling and Simulation of Biological Systems Workshop
Ciudad: Montevideo
Año del evento: 2010
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica computacional
Medio de divulgación: Internet

3D Scaled model of HIV-1 transcriptional machinery (2010)

MACHADO, M. , PABLO D. DANS , L. DARRE , PANTANO, S
Publicado
Resumen
Evento: Regional
Descripción: 3er Latin American Protein Society Meeting
Ciudad: Salta, Argentina
Año del evento: 2010
Palabras clave: HIV Modelos tridimensionales a escala
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática estructural
Medio de divulgación: Papel
<http://www.laproteinsociety.org/>

Hybrid All-Atom/Coarse-Grain Models for DNA Simulations in Implicit and Explicit Solvents (2010)

PABLO D. DANS , L. DARRE , MACHADO, M. , ZEIDA, A. , PANTANO, S
Publicado
Resumen
Evento: Internacional
Descripción: Congrès de Chimie Théorique
Ciudad: Anglet - Francia
Año del evento: 2010
Palabras clave: Coarse-grain Molecular dynamics nucleic acids
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica computacional
Medio de divulgación: Papel
<http://quitel.univ-pau.fr/live/inicio>

Hybrid All-Atom/Coarse-Grain Models for DNA Simulations in Explicit Solvents (2010)

PABLO D. DANS , L. DARRE , MACHADO, M. , ZEIDA, A. , PANTANO, S
Publicado

Resumen
Evento: Internacional
Descripción: Conference on Molecular Aspects of Cell Biology: A Perspective from Computational Physics
Ciudad: Trieste - Italia
Año del evento: 2010
Palabras clave: Coarse-grain Molecular dynamics nucleic acids
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica computacional
Medio de divulgación: Papel
http://cdsagenda5.ictp.trieste.it/full_display.php?smr=0&ida=a09170
Co-financiado por las Naciones Unidas y el International Center for Theoretical Physics (ICTP)

Coarse Grained Models for Atomic-Detailed DNA Simulation with Explicit Electrostatics (2010)

PABLO D. DANS , MACHADO, M. , L. DARRE , ZEIDA, A. , PANTANO, S
Publicado
Resumen
Evento: Internacional
Descripción: 2do Congreso Argentino de Bioinformática
Ciudad: Quilmes, Argentina
Año del evento: 2010
Palabras clave: Simulaciones ADN Modelos simplificados
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica computacional
Medio de divulgación: Papel
<http://a2b2c.org.ar/quilmes-2010-programa.html>

Improving the performance of our coarse-grain model for dna simulations (2010)

ZEIDA, A. , PABLO D. DANS , MACHADO, M. , PANTANO, S
Publicado
Resumen
Evento: Internacional
Descripción: 2do Congreso Argentino de Bioinformática
Ciudad: Quilmes, Argentina
Año del evento: 2010
Palabras clave: Simulaciones Modelos simplificados desempeño costo/presición
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica computacional
Medio de divulgación: Papel
<http://a2b2c.org.ar/quilmes-2010-programa.html>

WT4: a new coarse grain model for water (2010)

L. DARRE , MACHADO, M. , PABLO D. DANS , F. E. HERRERA , PANTANO, S
Publicado
Resumen
Evento: Internacional
Descripción: 2do Congreso Argentino de Bioinformática
Ciudad: Quilmes, Argentina
Año del evento: 2010
Palabras clave: Coarse-grain Molecular dynamics water electrolytes
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica computacional
Medio de divulgación: Papel
<http://a2b2c.org.ar/quilmes-2010-programa.html>

Non topological coarse-grained model for simulating RNA fragments in the multi μ s timescale (2009)

PABLO D. DANS , PANTANO, S
Publicado
Resumen
Evento: Internacional
Descripción: VII Iberoamerican Congress of Biophysics
Ciudad: Buzios
Año del evento: 2009
Palabras clave: Modelos Coarse-Grain Simulaciones biomoleculares

Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica/Bioinformatica
Medio de divulgación: Papel
<http://www.sbbf.org.br/congresso2009/>

IPMONT researches feasible with Grid Computing (2009)

PABLO D. DANS
Publicado
Resumen
Evento: Internacional
Descripción: EELA-2 Grid Computing Workshop
Ciudad: Montevideo
Año del evento: 2009
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Calculo intensivo
Medio de divulgación: Internet

Development of a coarse-grained model at the base-level for DNA (2009)

PABLO D. DANS , ZEIDA, A. , PANTANO, S
Publicado
Resumen
Evento: Internacional
Descripción: VII Iberoamerican Congress of Biophysics
Ciudad: Buzios
Año del evento: 2009
Palabras clave: Modelos Coarse-Grain Simulaciones biomoleculares
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica/Bioinformatica
Medio de divulgación: Papel
<http://www.sbbf.org.br/congresso2009/>

Desarrollo de un modelo simplificado para simulación de ADN (2009)

ZEIDA, A. , PABLO D. DANS , PANTANO, S
Publicado
Resumen
Evento: Nacional
Descripción: 6tas Jornadas de la Sociedad de Bioquímica y Biología Molecular de la Sociedad Uruguaya de Biociencias
Ciudad: Montevideo
Año del evento: 2009
Palabras clave: Modelos Coarse-Grain Simulaciones biomoleculares
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica/Bioinformatica
Medio de divulgación: Papel
<http://www.iibce.edu.uy/SBBM/>

Singularidades del compuesto antitumoral oxaliplatino evidenciadas por comparación de potenciales electrostáticos 3D (2009)

MERLINO, A. , MARÍN, R. M. , PABLO D. DANS , DAZA, E. E. , E. LAURA COITIÑO
Publicado
Resumen
Evento: Nacional
Descripción: 6tas Jornadas de la Sociedad de Bioquímica y Biología Molecular de la Sociedad Uruguaya de Biociencias
Ciudad: Montevideo
Año del evento: 2009
Palabras clave: Data mining Analogos del Cisplatino Oxaliplatino
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Físicoquímica computacional
Medio de divulgación: Papel
<http://www.iibce.edu.uy/SBBM/>

Scaling properties of biopolymers assessed through protein crystal structures (2009)

GRAÑA, M , ROMERO, H , PABLO D. DANS , NAYA, H

Publicado

Resumen expandido

Evento: Internacional

Descripción: 5th ISCB Student Council Symposium

Ciudad: Estocolmo

Año del evento: 2009

Palabras clave: Datamining Base de datos estructurales Scaling en proteínas

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica computacional

Medio de divulgación: Papel

Desarrollo de un modelo híbrido All-Atom / Coarse-Grain para acidos nucleicos (2008)

PABLO D. DANS , PANTANO S

Publicado

Resumen

Evento: Local

Descripción: 1eras Jornadas de Bioinformática Local

Ciudad: Montevideo

Año del evento: 2008

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica computacional

Medio de divulgación: Internet

From Mono to Bifunctional Binding of Cisplatin to DNA: Characterizing the Sequence-Dependent DNA Structural Changes with QM/MM Methods (2008)

PABLO D. DANS , E. LAURA COITINÑO , CRESPO, A. , DARÍO A. ESTRIN

Publicado

Resumen

Evento: Internacional

Descripción: Conference on modeling and computation of structure and dynamics of condensed phase systems

Ciudad: Trieste

Año del evento: 2008

Palabras clave: Interacción Cisplatino-ADN Modelado QM/MM

Areas de conocimiento:

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

Electroquímica / Química Computacional

Medio de divulgación: Papel

Cisplatin, cis-[Pt(NH₃)₂Cl₂] -a widely used anticancer drug- displays its activity primarily by modifying genomic DNA through a mechanism involving activation by hydrolysis prior to the N7 bonding on two adjacent purines that bends and unwinds DNA, causing a distortion that triggers the apoptotic pathway. Cisplatin-d(GpG) is the mayor adduct -65% of DNA injuries-, followed by ~25% of d(ApG) 1,2 intrastrand cross-links. No d(GpA) adducts have been observed, a fact initially attributed to steric hindrance between Cisplatin NH₃ ligands and the exocyclic NH₂ in A. Finding the explanation incomplete compelled some of us to study how B-DNA local environments modulate G/A intrinsic trend to react within representative Cisplatin targets. DFT studies on G/A platination by Friesner et al. using bare nucleobases clearly supported Cisplatin kinetic/thermodynamic preference to G over A, but still lacked in the discrimination among 5/3 purines positions. Last year, Mantri et al. have calculated the approximated activation free energies for the d(pApG) and d(pGpA) closure showing that the bifunctional adducts formation is ~9 Kcal more favorable for the AG sequence. However, the diaqua-substituted derivatives of Cisplatin was used for the bifunctional adduct formation (nowadays, the monoaquo-substituted derivatives of Cisplatin is considered the most important active compound under physiological conditions). Also, the unconstrained optimization of the dinucleotides without considering DNA context did not allow them to conclude about the thermodynamic and structural differences. This point out the need of conducting studies on purines platination using more realistic models of DNA, able to include the influence of the macromolecular context in near physiological environment. In the present work three B-DNA 6 bp structures embedding Cisplatin GG, AG and GA intrastrand targets have been generated under near physiological conditions (37 °C, 1 atm, electroneutrality by Na⁺ counterions) with Molecular Dynamics simulations (AMBER force field, TIP3P water in a octahedral box under PBC). 5G/3G monoadducts (5G/3G in GG; 3G in AG; 5G in GA) corresponding to reaction with mono- and diaquated Cisplatin derivatives have been generated on

representative structures and optimized by QM/MM at the platinated region within each physiological DNA frame. The relaxed part of each structure included the drug moiety and the bonded G -described through a quantum DFT approach up to the center of the respective N-C glycosyl linkage- together with all the classical atoms comprised in a 8 Å regions from the former (~615 atoms). A detailed analysis of the electronic structure over the 4 central nucleobases in the 5G/3G sequences has also been performed by QM/MM single-point calculations considering both single and double strand quantum windows. This made possible to assess the nature of the electron density reorganization accompanying 5G/3G platination, pointing out a not negligible role for H-bond communication between complementary nucleobases in the process. To characterize bifunctional adducts formation, structural changes from the calculated 5G/3G in the GG monofunctional adducts were analyzed using the available experimental structures (PDB ID: 1a84, 1aio and 1au5). Results reveal a more favorable bifunctional closure starting from the 5G monofunctional adduct in the GG sequences.

Development of a coarse-grained model of DNA and bulk water to tackle the simulation of DNA-drug interactions at the mesoscopic scale (2008)

PABLO D. DANS , MACHADO, M. , PANTANO, S

Publicado

Resumen

Evento: Internacional

Descripción: International Conference on Drug Design and Discovery for Developing Countries

Ciudad: Trieste

Año del evento: 2008

Palabras clave: Simulaciones moleculares Modelos Coarse-Grain para acidos nucleicos

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica computacional

Medio de divulgación: Papel

All-atoms molecular dynamics (MD) simulations are a very powerful tool to predict structural, dynamical, and thermodynamical properties of biological molecules. Nevertheless the current computational power constrains this analysis to time scales of a few hundreds of nanoseconds, too short to follow several important biological processes, such as ligand-biomolecules recognition, protein-protein interactions, transcription regulation, signaling, complex self-assembly, etc. In addition, the number of degrees of freedom of biological systems is very large, and an appropriate phase space exploration of large length scales biological molecules is not feasible. To bridge the gap between times scales of practicable simulations and those of biologically relevant motions and also fill the lack between a microscopic representations of biomolecules to mesoscopic length scales, several simplified methods have been proposed. One type of such methods are based on a coarse-grained (CG) representation of the all-atoms system in which the potential energy is expressed in terms of harmonic springs between spatially close effective centroids representing functional groups or residues in biomolecules. Several properties calculated with these approaches agree well with experimental and/or MD data with significantly less computational efforts. While adequate representations of DNA exist at the atomic (all-atoms) and continuum level, there is a relative lack of models capable of describing its behavior at mesoscopic length scales. In addition, the need of a coarse-grain model of DNA that preserves the molecular recognition and specificity between DNA strands and between DNA and physiological conditions compelled us to develop a mesoscale model of DNA that reduces the complexity of a nucleotide to six interactions sites. This model preserves the 5-3 structural polarity of the DNA chains and the molecular nature of the Watson-Cricks hydrogen bonds. As most of the degrees of freedom of a biological system, and hence the computational demand to simulate it, are generally associated with the environment (solvent, ions concentration, etc.), we also present a coarse-grained model to describe bulk water (WAT4 model) in which five water molecules are replaced with four effective centroids. Three duplex DNA sequences, each containing 24 base pairs (bp), namely d{pA24}d{pT24}, d{pC24}d{pG24}, and a 24 bp extension of the Dickersons dodecamer d{pCpGpCpGpApApCpGpCpGpApApTpTpCpGpCpGpTpTpCpGpCpG}2 were simulated with MD methods using all-atoms and the coarse-grained representations. For DNA, parameters compatibles with amber type force fields are being adjusted to reproduce the structural behavior of the double helix. Preliminary results about the DNA structural stability and the transitions from the A to the B form are presented. In the WAT4 model the parameters that are also compatibles with the amber force field are being tuned to reproduce water properties like fluidity, and radial distribution function of water molecules. These models provide a scaffold for a more realistic representation of Drug-DNA interactions within a biological environment.

Aspectos mecanísticos de la interconversión directa e inversa del Cisplatino/Transplatino (2007)

PABLO D. DANS , E. LAURA COITIÑO

Publicado
Resumen
Evento: Internacional
Descripción: XXXIII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina (QUITEL)
Ciudad: La Habana
Año del evento: 2007

Palabras clave: Modelado cuantico Isomerización del Cisplatino

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

Whereas Cisplatin [cis-diamminedichloroplatinum(II)] is one of the leading anticancer drugs currently in use against several solid and disseminated tumors, Transplatin -its trans isomer- does not display cytotoxicity. Under this light, Cisplatin to Transplatin isomerization becomes a relevant subject of study, conceived as one of the possible inactivation paths for the drug, both under storage conditions as well as once in the body. In recent times, several single and multinuclear trans square planar Pt(II) species have been shown to display anticancer activity or cytotoxicity, defying decades of mainstream in synthesis and screening of new potential analogues essentially oriented towards cis Pt(II) compounds (according to Cleare-Hoeschele SAR rules established in the 70s). The advent of trans species into the world of drug candidates also places interest in studying the fundamentals of trans to cis conversion processes. In this work cis-trans conversion from Cisplatin to Transplatin and viceversa have been characterized at a molecular level. Based on the trans-influence and trans-effect, two different reaction paths are proposed here, each one constituted by three elementary SN2 steps as follows: a) aquation of each original species; b) isomerization of the activated monoquo derivative; c) substitution of water by the original ligand. As far as we know, transition states connecting the isomerizing aquo species and several intermediates are reported here for the first time. All the stable (reactants, products and 10 possible intermediate complexes) and 6 transition state structures were optimized in vacuo without restrictions at the B3LYP/6-31G*/LANL2DZ level of theory and characterized based on the analytical Hessian. The effect of the equilibrated bulk solvent (water) in the energetics -barriers comprised within 13 and 37 kcal/mol- and several structural and reactivity descriptors emerged from a DFT conceptual approach was introduced by means of single point calculations at the same level using the IEF-PCM continuum model and UAKS radii for general shape cavities containing solutes. The obtained results show isomerization of the aquo species as the rate-determinant step of the cis-trans conversion. Whereas Cisplatin isomerization is feasible, Transplatin is considerably less prone to convert (activation barriers of 24 and 37 kcal/mol, respectively) in agreement with experimental observation under laboratory conditions.

Water dynamics in the hydration layer around central base-pairs in DNA sequences relevant to its damage and treatment (2007)

PABLO D. DANS , MOURGLIA, G , E. LAURA COITIÑO

Publicado

Resumen

Evento: Internacional

Descripción: International Congress of Biological Physics

Ciudad: Montevideo

Año del evento: 2007

Palabras clave: Simulaciones moleculares Hidratación del ADN

Areas de conocimiento:

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

Since late eighties it is well known that conformational flexibility and thermodynamic stability of DNA owes essentially to his interaction with the medium, especially in aqueous solution.1 Several experimental and theoretical studies has focused on the hydration patterns of DNA related to the predominant biological structural conformation and the transition between these conformations in different medium.2 A few years later the attention was put towards the description of the water molecules in the first hydration layers of the DNA showing the existence of structural water and different hydration patterns between the major and minor groove.3 In addition, the first hydration layer of the singular nucleobases showed to be different, having clear implications on the sequence-dependent recognition of DNA through base-specific hydration.1b Recently, studies of water dynamics were focused to understand hydration changes accompanying binding and intercalation of small ligands with DNA or the effects of hydration on the electronic and hole transport properties of DNA related to oxidative damage.4 In this work, molecular dynamics (MD) simulations were performed to B DNA duplex dodecamer 5-CGCTTxxTTGCG-3 containing five different central base pairs motives relevant to oxidative damage (guanine runs, xx=GG) and to

cancer treatment with chemotherapeutic agents as those of the Cisplatin and Mytomycin family (xx=AG, GA, CG and GC). 1 ns of production MD in explicit solvent was achieved using the parm99 parameter set in physiological conditions. To verify convergence of the trajectory special emphasis was put on the early structural detection of spines of hydration in the minor groove, extensive hydration of mayor groove and cones of hydration around phosphate groups. The comparative analysis of the micro-hydration around the central base pairs was done by means of radial distribution and pair correlation functions, residence times and density iso-surface of water molecules.

Gaining insight on how local an global environment tunes intrinsic reactivity of purines towards oxidative processes in DNA (2007)

E. LAURA COITIÑO , PABLO D. DANS , CASTRO, A

Publicado

Resumen

Evento: Internacional

Descripción: International Congress of Biological Physics

Ciudad: Montevideo

Año del evento: 2007

Palabras clave: Modelado cuantico Reactividad del ADN

Areas de conocimiento:

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

Electroquímica / Química Computacional

Medio de divulgación: Papel

Educación en Química de la Atmósfera y Polución: Experiencias Universitarias Presenciales y a Distancia, Reflexiones y Propuestas (2006)

M. MACHADO , PABLO D. DANS , E. Laura Coitiño

Publicado

Resumen

Evento: Nacional

Descripción: Jornadas de Enseñanza Ambiental

Ciudad: Montevideo

Año del evento: 2006

Editorial: Intendencia Municipal de Montevideo

Areas de conocimiento:

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

Ciencias Medioambientales / Química de la atmósfera y polución

Medio de divulgación: Internet

QSAR and Datamining on Theoretical Predictors for the Anticancer Profile of a Series of 35 Pt/Pd Square-Planar Complexes (2006)

PABLO D. DANS , E. LAURA COITIÑO

Publicado

Resumen

Evento: Internacional

Descripción: en la Conference on Drug Development for the Third World, International Centre for Theoretical Physics (ICTP)

Ciudad: Trieste

Año del evento: 2006

Palabras clave: Modelado cuantico Datamining sobre propiedades moleculares DFT conceptual

Areas de conocimiento:

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

Electroquímica / Química Computacional

Medio de divulgación: Papel

A MD and QM/MM Characterization of Cisplatin-Guanine Monoadducts Embedded in B-DNA Hexamers under Physiological Conditions (2006)

PABLO D. DANS , E. LAURA COITIÑO , CRESPO, A., DARÍO A. ESTRIN

Publicado

Resumen

Evento: Internacional

Descripción: Eighth Giambiagi Winter School and Workshop Research trends in clusters, biomolecules and materials

Ciudad: Buenos Aires

Año del evento: 2006

Palabras clave: Interacción Cisplatino-ADN Modelado QM/MM

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

Cisplatin, cis-[Pt(NH₃)₂Cl₂] -a widely used anticancer drug- primarily displays its activity by modifying genomic DNA through a mechanism involving activation by hydrolysis prior to N7 bonding to two adjacent purines that bends and unwinds DNA, causing a distortion that triggers the apoptotic pathway. 1a Cisplatin-d(GpG) is the mayor adduct -65% of DNA injuries-, followed by ~25% of d(ApG) 1,2 intrastrand cross-links. No d(GpA) adducts have been observed, a fact initially attributed to steric hindrance between Cisplatin NH₃ ligands and the exocyclic NH₂ in A. 1b Finding the explanation incomplete compelled some of us to study how B-DNA local environments modulate G/A intrinsic trend to react within representative Cisplatin targets. 2 Our ab initio-PCM2a,b and ONIOM (HF/AMBER)2c results confirmed the existence of a clear correlation between the location a purine has in DNA and its trend to react with small electrophiles, reproducing the observed pattern of Cisplatin-DNA adducts and also shedding light into some experimental controversies about DNAs platination kinetic preferences. 1b,3 DFT studies on G/A platination by Friesner et al.4 using bare nucleobases clearly supported Cisplatin kinetic/thermodynamic preference to G over A, but still lacked in the discrimination among 5/3 purines positions. This point out the need of conducting studies on purines platination using more realistic models of DNA, able to include the influence of the macromolecular context and the physiological environment. In the present work three B-DNA 6 bp structures embedding Cisplatin GG, AG and GA intrastrand targets have been generated under physiological conditions (37 °C, 1 atm, electroneutrality by Na⁺ counterions) with Molecular Dynamics simulations (AMBER force field, TIP3P water in a octahedral box under PBC). Variations on the electronic structure accompanying thermal fluctuations have been followed by single point QM/MM (PBE/AMBER) calculations expanded over a 4 bp window on snapshots taken from the last 0.5 ns of simulation. 5G/3G monoadducts (5G/3G in GG; 3G in AG; 5G in GA) corresponding to reaction with mono- and diaquated Cisplatin derivatives have been generated on representative structures and optimized by QM/MM at the platinated region within each physiological DNA frame. The relaxed part of each structure included the drug moiety and the bonded G -described through a quantum DFT approach up to the center of the respective N-C glycosyl linkage- together with all the classical atoms comprised in a 8 Å region from the former. A detailed analysis of the electronic structure over the 4 central nucleobases in the 5G*G sequence has also been performed by QM/MM single point calculations considering both single and double strand quantum windows. This made it possible to assess the nature of the electron density reorganization accompanying 5G platination, pointing out a not negligible role for H-bond communication between complementary nucleobases in the process.

Why do CpG and GpC steps display different reactivity patterns in DNA? (2006)

MOURGLIA, G , PABLO D. DANS , E. LAURA COITIÑO

Publicado

Resumen

Evento: Internacional

Descripción: Eighth Giambiagi Winter School and Workshop Research trends in clusters, biomolecules and materials

Ciudad: Buenos Aires

Año del evento: 2006

Palabras clave: Simulaciones moleculares ADN

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

DNA oxidative damage plays an important role at the cellular level, being associated with mutagenic and carcinogenic processes as well as with cellular ageing and several neurological disorders.(1) Nucleobases -mainly purines- undergo chemical transformations resulting in DNA damage, depending on the specific and unique local environments in DNA, a fact that becomes central to understand and predict preferential sites of attack by electron acceptor agents and ionizing radiation. Having the lowest ionization potential (IP) among the four DNA bases, Guanine (G) is the principal target for oxidative damage. Theoretical and empirical work has been conducted addressing the relationship between G reactivity and its particular local environment in DNA, basically characterized by the helix conformation and flanking bases in the sequence.(2-4) Early Ab initio studies showed that in general 5Gs IP values are lower than for 3G, being thus guanine more prone to react when located in the 5 position.(4) Studies performed in our group working on 4

bases single strand DNA showed that compared to other G flanking sequences 5G/3G IP differences are stressed in 5TGpCT3 vs. 5TCpGT3 DNA local environments, a pattern that seemed to be unaffected by cytosine (C) methylation.(5) However, methylation of C in 5CpG3 steps has been shown to alter the reactivity pattern of DNA(6,7) by enhancement of the reactivity at G in the complementary strand, a fact that could be explained by assuming N2 nucleophilicity in G is increased by density reorganization through the hydrogen bond between complementary bases.(7) Since 95% of cytosine in CpG islands within regulatory regions of mammal genes is methylated (6) and methylation patterns are altered in neoplasms (having thus a potential role in carcinogenesis) exploring the intimate structural causes of G reactivity variations in GpC vs. CpG steps and in their methylated counterparts in more realistic conditions has been the scope of the present work. Molecular dynamics simulations using the AMBER force field have been performed in physiological conditions (310.15 K, 1 atm, electroneutrality by Na⁺ counterions, in a TIP3P octahedral box of 10 Å within periodic boundary conditions) for B DNA duplex dodecamers 5CGCTTxxTTGCG3 containing xx = GpC, CpG, Gp5mC and 5mCpG using AMBER 7.0. A detailed comparative analysis of several structural parameters characterizing DNA has been performed using CURVES 5.0.

Estudio de la hidratación de dos purinas centrales y su efecto en la reactividad de hexámeros de B-ADN simulados en condiciones fisiológicas (2006)

PABLO D. DANS , E. LAURA COITIÑO

Publicado

Resumen

Evento: Nacional

Descripción: 5as Jornadas de Bioquímica y Biología Molecular - SBBM/SUB

Ciudad: Montevideo

Año del evento: 2006

Palabras clave: Modelado QM/MM Simulaciones moleculares Hidratación del ADN

Areas de conocimiento:

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

Electroquímica / Química Computacional

Medio de divulgación: Papel

Desde finales de los 80 es sabido que la estabilidad y flexibilidad conformacional del ADN se debe fundamentalmente a su interacción con el entorno acuoso^{1a,b}. En particular, estudios experimentales y teóricos han centrado su atención en los patrones de hidratación relacionados al equilibrio de las formas predominantes biológicamente (A y B-ADN) y su transición en diferentes entornos². Trabajos más recientes se han enfocado hacia la descripción de las moléculas de agua en las primeras esferas de solvatación del ADN evidenciando la existencia de agua estructural y patrones de hidratación dependiente de la secuencia diferentes entre surco mayor y menor^{3a,b}. En particular, se han observado diferentes patrones de enlace de hidrógeno con el ADN y entre las moléculas de agua de la primera esfera de solvatación de las bases Adenina (A) y Guanina (G) lo que tiene claras implicancias sobre el reconocimiento secuencia-específico del ADN a través de la solvatación base-específica^{1b}. A su vez, la hidratación diferencial y la ubicación en el ADN de las purinas implican también cambios en su reactividad en términos de reorganización electrónica y transporte de carga⁴. En este trabajo se presenta un estudio de la hidratación de tres hexámeros de ADN ds(CpTpGpGpTpC), ds(CpTpApGpTpC) y ds(CpTpGpApTpC) simulados con métodos de Dinámica Molecular (AMBER) en condiciones fisiológicas (37°C, 1 atm. y electroneutralidad) usando el campo de fuerza AMBER y una caja octaédrica de solvente TIP3P en condiciones periódicas. La reactividad en términos de densidad electrónica se analiza con métodos mixtos QM/MM (HF/AMBER) ONIOM implementado en el programa Gaussian03.

Análisis estructural comparativo del daño oxidativo secuencial del ADN G - oxoG - sitio AP simulado en condiciones fisiológicas (2006)

MOURGLIA, G , PABLO D. DANS , E. LAURA COITIÑO

Publicado

Resumen

Evento: Nacional

Descripción: 5as Jornadas de Bioquímica y Biología Molecular - SBBM/SUB

Ciudad: Montevideo

Año del evento: 2006

Palabras clave: Simulaciones moleculares Daño de ADN

Areas de conocimiento:

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

Electroquímica / Química Computacional

Medio de divulgación: Papel

Trabajando en la actualización del profesorado en la enseñanza de conceptos vinculados a la estructura molecular apoyados por herramientas computacionales para su visualización y diseño 3D (2005)

E. Laura Coitiño, M. MACHADO, PABLO D. DANS, VANESSA LEONE

Publicado

Resumen

Evento: Nacional

Descripción: Seminario-Taller: La enseñanza de las ciencias y el ingreso a la Universidad

Ciudad: Montevideo

Año del evento: 2005

Áreas de conocimiento:

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

Electroquímica / Enseñanza de la fisicoquímica

Medio de divulgación: Internet

Generando espacios para conocer y acercar perspectivas sobre visiones de la actividad científica, sus protagonistas y sus interacciones con la sociedad presentes en la interfase ANEP-UdelaR (2005)

E. Laura Coitiño, BONILLA, B., PABLO D. DANS, MARTINEZ DEBAT, CLAUDIO

Publicado

Resumen

Evento: Nacional

Descripción: Seminario-Taller: La enseñanza de las ciencias y el ingreso a la Univer

Ciudad: Montevideo

Año del evento: 2005

Medio de divulgación: Internet

Un enfoque teórico para el estudio de metales en sistemas biológicos: ejemplo de una aplicación al diseño de fármacos de Pt(II) y Pd(II) para el tratamiento del cáncer (2005)

PABLO D. DANS, E. LAURA COITIÑO

Publicado

Resumen

Evento: Regional

Descripción: curso regional AMSUD-Pasteur: Metales en Sistemas Biológicos

Ciudad: Montevideo

Año del evento: 2005

Palabras clave: Modelado cuantico Metales en sistemas biológicos

Áreas de conocimiento:

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

Electroquímica / Química Computacional

Medio de divulgación: CD-Rom

El gran interés que despiertan los compuestos basados en metales de transición como el platino en el tratamiento de una gran variedad de tumores sólidos, debe su origen al descubrimiento de la acción antineoplásica del Cisplatino en el año 1970. A pesar de los excelentes resultados logrados con el Cisplatino, el mismo presenta limitaciones relacionadas con su toxicidad y con la aparición de resistencia intrínseca y/o adquirida en algunas líneas celulares. Esto último sigue siendo cierto, con distintos perfiles farmacológicos y toxicológicos, para varios compuestos de platino derivados. Todo ello ha fomentado la búsqueda de análogos de eficacia similar o mayor en la quimioterapia del cáncer, pero con perfiles farmacológicos que exhiban menor toxicidad y efectos laterales, y más baja incidencia de resistencia. Entre cientos de compuestos análogos sintetizados hasta la fecha sólo uno de ellos, el Carboplatino, ha sido aprobado mundialmente para su uso terapéutico. No obstante ello, la búsqueda continúa. Dentro de los casos concretos estudiados se incluye: i) compuestos de platino en la forma trans; ii) grupos salientes en posición cis distintos de cloro (i.e.: ciclobutanodicarboxilato, oxalato); iii) aminas secundarias, terciarias o heterocíclicas, funcionando como ligandos mono y bidentados; iv) compuestos de Pt(IV); v) compuestos multi-nucleares de platino; y vi) compuestos con metales distintos al platino (Pd, Au, Ru, Re, etc.). Entre los compuestos de Pt(II) (actualmente en fase III de experimentación) y Pd(II) pueden destacarse dos grandes familias como muy prometedoras: 1. compuestos en los que los ligandos nitrogenados (espectadores) del Cisplatino se sustituyen por diaminociclohexano (Dach); y 2. compuestos en los que estos ligandos son sustituidos por piridinas (Py). Con el objetivo de establecer pautas claras que permitan guiar la búsqueda de nuevos potenciales fármacos, en éste trabajo se utilizan los métodos y modelos de la química teórica y computacional en su versión cuántica y mixta QM/MM (Quantum Mechanics/Molecular Mechanics). En primer lugar, se realiza un análisis estructural detallado (con ab initio y Funcionales de la Densidad) de 26 compuestos de Pt(II) o Pd(II) con la finalidad de establecer correlaciones estructura-actividad y estructura-propiedad. En segundo lugar, para adentrarnos en el conocimiento del mecanismos de acción, se estudia la distribución previa a la

llegada al blanco molecular y la activación de los potenciales fármacos seleccionados evaluando la variación del cambio del metal y de los sustituyentes sobre la termodinámica y cinética de algunas de las posibles transformaciones elementales (isomerización cis-trans y acuación) que los compuestos pueden sufrir antes de unirse al ADN. La cinética de los procesos seleccionados se evalúa en el marco de las teorías clásica y variacional del estado de transición. Por último, con el objetivo de estudiar la reactividad en la formación de los productos entre los compuestos y el blanco molecular y lograr predecir el patrón observado de unión al ADN se analizan las características estructurales de los aductos formados entre la forma activa de los compuestos seleccionados y modelos químicos que van desde las nucleobases Adenina (A) y Guanina (G) hasta 24 pb de B-ADN con contra-iones. En todos los modelos se tiene en cuenta el efecto del solvente: En los componentes químicos más pequeños el modelo del continuo en su implementación IEF-PCM es utilizado; En los modelos de gran dimensión donde un enfoque mixto (QM = Funcionales de la densidad/ MM = AMBER reparametrizado para platino) es preferido, se opta por la inclusión del solvente de forma discreta en condiciones periódicas de contorno (PBC).

Diagnóstico sobre la Educación a Distancia en la UdelaR (2004)

VICCI, G , ESPÍNDOLA, F. , PABLO D. DANS , CONTERA, C.

Publicado

Resumen

Evento: Regional

Descripción: Programa Interinstitucional Comunidades Virtuales de Aprendizaje (PROVIA)

Ciudad: Porto Alegre

Año del evento: 2004

Editorial: Facultad de Educación de la UFRGS (Universidade Federal do Rio Grande do Sul)

Areas de conocimiento:

Ciencias Sociales / Ciencias de la Educación / Ciencias de la Educación /

Medio de divulgación: Internet

Análisis Estadístico con Descriptores Cuánticos DFT sobre una población de 21 Compuestos Análogos del Cisplatino (2004)

PABLO D. DANS , E. LAURA COITIÑO

Publicado

Resumen

Evento: Internacional

Descripción: XXX Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina (QUITEL)

Ciudad: Porto

Año del evento: 2004

Palabras clave: Modelado cuantico Datamining sobre propiedades moleculares DFT conceptual

Areas de conocimiento:

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

Electroquímica / Química Computacional

Medio de divulgación: Papel

El Cisplatino es un fármaco usado con gran éxito en el tratamiento de una gran variedad de tumores sólidos. A pesar de los excelentes resultados logrados presenta ciertas limitaciones relacionadas con su toxicidad y con la aparición de resistencia intrínseca y/o adquirida en algunas líneas celulares. Esto último ha motivado la búsqueda de análogos de eficacia similar o mayor en el tratamiento del cáncer con perfiles farmacológicos de menor toxicidad y más baja incidencia de resistencia. A la hora de proponer y diseñar racionalmente nuevos compuestos son numerosos los aspectos que hacen al modo de acción molecular que deben ser analizados. Entre ellos se destacan: i) los procesos de bio-disponibilidad, que dependen de un fino balance entre la velocidad de hidrólisis de los compuestos (etapa de activación del fármaco), la capacidad para reaccionar con grupos químicos otros diferentes de su blanco molecular (especificidad) y la capacidad para atravesar membranas biológicas; ii) los procesos de detoxificación, particularmente los relacionados con la eliminación del metal pesado acumulado en distintos órganos; y iii) los procesos de resistencia celular, cuyos mecanismos bioquímicos son poco conocidos. Varios de estos aspectos pueden ser racionalizados en base a la determinación y estudio de descriptores de la estructura molecular. Con el objetivo de sistematizar dicha información, estableciendo correlaciones estructura-propiedad que permitan guiar la búsqueda de nuevos compuestos, en este trabajo se ha conducido un análisis estructural detallado a nivel HF y B3LYP del Cisplatino y 21 análogos cuadrados planos de Pt(II) y Pd(II). Todas las especies involucradas han sido optimizadas y caracterizadas utilizando el conjunto de base 6-31G(d) para los átomos de C, N, O, H, F y Cl y el pseudopotencial LanL2DZ y base asociada para los metales de transición. Se ha puesto especial énfasis en el análisis de potenciales electrostáticos moleculares, orbitales de frontera (tomados como aproximaciones a la función de Fukui), cargas atómicas NPA, potenciales lipofílicos,

parámetros geométricos, volúmenes y superficies accesibles al solvente. En nuestro estudio el efecto del solvente se introduce mediante cálculos single-point con el modelo IEF-PCM sobre las estructuras optimizadas in vacuo a nivel DFT.

Estudio Teórico Comparativo del Mecanismo de la Reacción de Acuación de 7 análogos Cuadrados-Planos de Pt(II) y Pd(II) del Cisplatino (2004)

PABLO D. DANS , E. LAURA COITIÑO

Publicado

Resumen

Evento: Internacional

Descripción: XXX Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina (QUITEL)

Ciudad: Porto

Año del evento: 2004

Palabras clave: Compuestos de Pt(II) y Pd(II) Modelado cuantico Mecanismo de acuación

Areas de conocimiento:

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

Electroquímica / Química Computacional

Medio de divulgación: Papel

Entre los distintos compuestos con actividad farmacológica es usual la presencia de una etapa inicial de activación. El Cisplatino [Pt(NH₃)₂Cl₂], potente fármaco administrado con éxito para el tratamiento de varios tipos de cáncer, se active a través de procesos de acuación en forma previa al ataque de su blanco molecular. Estos procesos se dan en dos etapas elementales tipo SN₂, en las que el Cisplatino sustituye los iones Cl⁻ por sendas moléculas de agua, dando lugar a la formación de la especie diaquo [Pt(NH₃)₂(H₂O)₂]²⁺. Varios análogos cuadrados-planos del Cisplatino (con Pt(II) o Pd(II) como centro metálico) comparten el mecanismo concertado SN₂ que tiene lugar en la acuación. Entre ellos se destacan el Oxaliplatino y el ZDO473 que actualmente se encuentran respectivamente en el mercado o en fase III de experimentación. En este trabajo se presenta un estudio sistemático a nivel DFT de las especies participantes en las dos etapas de acuación del Cisplatino y sus siguientes 7 compuestos análogos: (imagen1) donde M = Pt(II) o Pd(II). La caracterización de las especies estables y estados de transición de ambas etapas de acuación (in vacuo y modelando el solvente con el métodos IEF-PCM) se realizó a nivel B3LYP usando el conjunto de base 6-31G(d) para los átomos de C, N, O, H y Cl y el pseudopotencial y base asociada LanL2DZ para los metales de transición. Cada especie ha sido completamente caracterizada en base al número de valores propios del Hessiano y en el caso de los estados de transición se ha chequeado su pertenencia al proceso en estudio a través de cálculos de camino de reacción de mínima energía (IRC). Para el caso del Cisplatino, nuestros resultados se encuentran en excelente concordancia con trabajos teóricos previos dando una sólida base para predecir el comportamiento de los análogos de los que existe menos información.

Comparative Analysis of the Hydrolysis of Cisplatin [Pt(II)(NH₃)₂Cl₂] and its Pd(II) Square-planar Analogue (2002)

PABLO D. DANS , E. LAURA COITIÑO

Publicado

Resumen

Evento: Internacional

Descripción: Sanibel Symposium

Ciudad: St. Augustine

Año del evento: 2002

Palabras clave: Modelado cuantico Mecanismo de acuación

Areas de conocimiento:

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

Electroquímica / Química Computacional

Medio de divulgación: Papel

Caracterización DFT de los procesos de hidrólisis de análogo del Cisplatino cis-bipiridina-dicloro-Pt(II) y sus aductos 1:1 con Guanina y Adenina (2002)

PABLO D. DANS , E. LAURA COITIÑO

Publicado

Resumen

Evento: Internacional

Descripción: XXVIII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina (QUITEL)

Ciudad: Montevideo

Año del evento: 2002

Palabras clave: Modelado cuantico Interacción compuestos Pt(II)-Nucleobases

Áreas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

El Cisplatino [Pt(II)(NH₃)₂Cl₂] es un potente fármaco antitumoral ampliamente usado en el tratamiento de varios tumores sólidos a pesar de los serios efectos secundarios que presenta tales como: nefrotoxicidad (daño de los túbulos renales); ototoxicidad (pérdida de audición); y toxicidad gastrointestinal (náuseas, vómitos y diarrea). Otros elementos negativos que se suman a los anteriores son el desarrollo de resistencia a la quimioterapia y la baja especificidad del fármaco. De lo anterior se desprende la necesidad de una búsqueda de compuestos alternativos que mejoren alguno o todos estos aspectos, manteniendo o incluso aumentando la citotoxicidad. En esta búsqueda, los compuestos cuadrados planos de Pt(II) con biperidinas parecen ser una alternativa interesante al ser más efectivos en su actividad antineoplásica, siendo más específicos y mostrando menos resistencia cruzada en líneas celulares previamente tratadas con Cisplatino. Un estudio detallado y sistemático de los aspectos estructurales y termodinámicos que caracterizan a los aductos formados por estos compuestos y el ADN, así como, de los aspectos cinéticos de ambos procesos de acución se torna necesario con el objetivo de entender las bases moleculares de su acción y establecer una serie de descriptores cuantitativos, que a su vez, generen pautas claras para la proposición de nuevos compuestos activos. En el marco de un proyecto más amplio, dirigido a establecer claramente las bases moleculares de la acción del Cisplatino y análogos, en el presente estudio se ha modelado el mecanismo S_N2 de la hidrólisis de los compuestos [cis-biperidinadichloroPt(II)] y [cis-biperidinadichloro(H₂O)Pt(II)] utilizando cálculos HF y B3LYP con la base 6-31G(d) para C, N, O, H y Cl y pseudopotenciales LanL2DZ para los metales de transición. Asimismo se ha caracterizado estructuralmente los aductos monofuncionales con adenina (A) y guanina (G). Cada especie ha sido completamente caracterizada en base al número de valores propios del Hessiano y en el caso de los estados de transición se ha chequeado su pertenencia al proceso en estudio a través de cálculos de camino de reacción de mínima energía. Estos resultados se comparan con los previamente obtenidos por nuestro grupo para el Cisplatino al mismo nivel. En nuestro estudio el efecto del solvente se introduce mediante cálculos single-point con el modelo PCM/IEF sobre las estructuras optimizadas in vacuo a nivel DFT.

Análisis comparativo DFT de la estructura y reactividad de 11 compuestos análogos del Cisplatino con potencial acción antineoplásica (2002)

PABLO D. DANS , E. LAURA COITIÑO

Publicado

Resumen

Evento: Internacional

Descripción: XXVIII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina (QUITEL)

Ciudad: Montevideo

Año del evento: 2002

Palabras clave: Modelado cuántico Datamining sobre propiedades moleculares

Áreas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

El gran interés que despiertan los compuestos basados en Platino en el tratamiento de una gran variedad de tumores sólidos, debe su origen al descubrimiento de la acción antineoplásica del Cisplatino [cis-diaminodichloroPt(II)] en el año 1970. A pesar de los excelentes resultados logrados, el Cisplatino presenta limitaciones relacionadas con su toxicidad (nefrotoxicidad, ototoxicidad y neurotoxicidad) y con la aparición de resistencia intrínseca y/o adquirida por parte de algunas líneas celulares. Todo ello ha fomentado la búsqueda de análogos de eficacia similar o mayor en la quimioterapia del cáncer, pero con perfiles farmacológicos que exhiban menor toxicidad y efectos laterales, y más baja incidencia de resistencia. Entre cientos de compuestos análogos sintetizados hasta la fecha, 28 fueron seleccionados para conducir ensayos clínicos en seres humanos; sólo uno de ellos, el Carboplatino ha sido aprobado mundialmente para su uso terapéutico. No obstante ello, la búsqueda continúa, destacándose dos grandes familias como muy prometedoras entre los compuestos actualmente en fase III de experimentación: i) compuestos en los que los ligandos nitrogenados del Cisplatino se sustituyen por diaminociclohexano (DACH); ii) compuestos en los que estos ligandos son sustituidos por piridinas (Py). Con el objetivo de racionalizar la información disponible estableciendo relaciones estructura-actividad que permitan guiar la búsqueda de compuestos con mejores propiedades farmacológicas, en este trabajo se ha conducido un análisis estructural detallado a nivel B3LYP (empleando la base 6-31G(d) para los átomos de la primera fila y el pseudopotencial LANL2DZ y base correspondiente para describir el centro metálico) del Cisplatino y 11 análogos cuadrado planos entre los que se incluye: Carboplatino; 5 representantes de la familia DACH [Oxalilplatino (1,2 trans dach)oxalato Pt(II), los tres isómeros RR, SS y RS del

(1,2 cis dach)dicloro Pt(II) y el (1,4-cis-dach)dicloro-Pt(II)]; 4 representantes de la familia Py [cis-amino(py)dicloroPt(II), cis amino(2 metilpiridina)dicloroPt(II), cis-amino(3-metilpiridina)dicloroPt(II) y cis (bipiridina)dicloroPt(II)] y finalmente el compuesto inactivo cis diaminodicloroPd(II). Se ha puesto especial énfasis en el análisis de potenciales electrostáticos moleculares mapeados sobre la densidad electrónica, orbitales de frontera (tomados como aproximaciones a la función de Fukui), cargas atómicas NPA y energías relativas de isómeros. El efecto del solvente sobre la densidad electrónica ha sido evaluado realizando cálculos single-point con el modelo IEF-PCM al mismo nivel de teoría.

Modificaciones en la estructura electrónica y otras propiedades en ADN dúplex tras la formación de lesiones con los fármacos antitumorales Cisplatino y Oxaliplatino (2002)

E. LAURA COITIÑO , CAL, K , PABLO D. DANS , CASTRO, A

Publicado

Resumen

Evento: Internacional

Descripción: XXVIII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina (QUITEL)

Ciudad: Montevideo

Año del evento: 2002

Palabras clave: Modelado cuantico Unión covalente a ADN Antitumorales de Pt(II)

Areas de conocimiento:

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

Electroquímica / Química Computacional

Medio de divulgación: Papel

Empleo de las TIC como apoyo a la enseñanza de la Físicoquímica Molecular en el contexto de la licenciatura en bioquímica (2001)

E. Laura Coitiño , PABLO D. DANS , CASTRO, A. , VÁZQUEZ S.

Publicado

Resumen

Evento: Nacional

Descripción: Jornadas ISTECS - Uso de las TIC en la educación superior

Ciudad: Montevideo

Año del evento: 2001

Areas de conocimiento:

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

Electroquímica / Enseñanza de la fisicoquímica

Medio de divulgación: Internet

Structural consequences of the Pt/Pd substitution in anticancer drugs. An Ab Initio HF and DFT study of DNA lesion site models (2000)

PABLO D. DANS , E. LAURA COITIÑO

Publicado

Resumen

Evento: Internacional

Descripción: Xth International Congress of Quantum Chemistry (ICQC)

Ciudad: Menton

Año del evento: 2000

Palabras clave: Modelado cuantico Antitumorales con Pt(II) y Pd(II)

Areas de conocimiento:

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

Electroquímica / Química Computacional

Medio de divulgación: Papel

Análisis estructural a nivel HF y DFT de los aductos principales formados por el ADN con fármacos de la familia del Cisplatino (2000)

PABLO D. DANS , E. LAURA COITIÑO

Publicado

Resumen

Evento: Internacional

Descripción: XXVI Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina (CHITEL)

Ciudad: Caxambu

Año del evento: 2000

Palabras clave: Modelado cuantico Interacción Cisplatino-ADN

Areas de conocimiento:

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

Modeling the mechanism of action of antitumoral drugs. A quantum mechanics study of the DNA-cPd interaction (1999)

PABLO D. DANS , E. LAURA COITIÑO

Publicado

Resumen

Evento: Internacional

Descripción: 39 Sanibel Symposium

Ciudad: St. Augustine

Año del evento: 1999

Palabras clave: Cisplatin-DNA interaction Molecular Modeling

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

Modelado de la interacción de complejos de paladio con bases del ADN en el contexto de su uso potencial como drogas antitumorales (1998)

PABLO D. DANS , E. LAURA COITIÑO

Publicado

Resumen

Evento: Internacional

Descripción: VII congreso ibero-americano de biología celular

Ciudad: Montevideo

Año del evento: 1998

Anales/Proceedings: Libro de resúmenes

Palabras clave: Modelado cuantico Interacción Cisplatino-Nucleobases

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

TEXTOS EN PERIÓDICOS O REVISTAS

Matrix, ADN y biofísica computacional (2019)

La Diaria

Periodicos

LAGOS, L. , PABLO D. DANS

Medio de divulgación: Papel

Fecha de publicación: 14/02/2019

Lugar de publicación: La Diaria

<https://ciencia.ladiaria.com.uy/articulo/2019/2/matrix-adn-y-biofisica-computacional/>

Entrevista realizada por Leo Lagos para La Diaria , editada por mi y con una imagen de mi autoría

La madre de todos los descubrimientos: La entrada en escena de la doble hélice de ADN en la primavera del 53 (2017)

UYpress

Revista

PABLO D. DANS

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Internet

Fecha de publicación: 22/03/2017

<http://www.uypress.net/auc.aspx?75966,162>

La importancia del ADN no codificante: estructura de la cromatina, los cromosomas y el núcleo (2016)

Allelos blog

Revista

PABLO D. DANS

Palabras clave: Estructura del ADN ADN no codificante

Áreas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Internet

Fecha de publicación: 20/10/2016

Lugar de publicación: Barcelona, España

<https://alelos.com/en/2016/10/442/>

Producción técnica

PRODUCTOS

Diseño de la primer plataforma de educación a distancia de la Universidad de la República (2004)

, Software

PABLO D. DANS

Implementada con PHP, Javascript, y HTML contra bases de datos MySQL para el curso de Educación Permanente: Química de la Atmósfera y Polución

País: Uruguay

Disponibilidad: Restringida

Producto con aplicación productiva o social: Sistema de base para impartir el curso de educación a distancia Química de la Atmósfera y Polución de Educación Permanente

Institución financiadora: Comisión Sectorial de Educación Permanente - UDELAR

Palabras clave: Plataforma de Educación a Distancia Integración de sistemas

Áreas de conocimiento:

Ingeniería y Tecnología / Ingeniería Eléctrica, Ingeniería Electrónica e Ingeniería de la Información / Telecomunicaciones / Desarrollo Web

Medio de divulgación: Internet

quimat.fcien.edu.uy

desarrollo de un guión para un CD interactivo para 3er año de Liceo, materia ciencias de la vida y la naturaleza (2004)

Prototipo, Otra

PABLO D. DANS

Desarrollo del CD interactivo de DEMO (Lingo y Javascript) y co-autor del guión técnico

País: Uruguay

Institución financiadora: ANEP-MEMFOD, Ministerio de Educación y Cultura

Palabras clave: CD Interactivo

Áreas de conocimiento:

Ingeniería y Tecnología / Ingeniería Eléctrica, Ingeniería Electrónica e Ingeniería de la Información / Telecomunicaciones / Programación LINGO y Javascript

Medio de divulgación: CD-Rom

TRABAJOS TÉCNICOS

Estudio estadístico de los contaminantes encontrados en la materia prima adquirida, y en sales y bebidas base vendidas de acuerdo a un muestreo realizado durante el período 2004-2006 por la empresa PEPSI Uruguay (2006)

Consultoría

PABLO D. DANS, CAYSSIALS, G., CAYSSIALS, V

Evaluar estadísticamente la calidad de los productos comprados, generados y exportados por PEPSI Uruguay

País: Uruguay

Idioma: Español

Ciudad: Colonia

Disponibilidad: Irrestringida

Número de páginas: 72

Duración: 3 meses

Institución financiadora: PEPSI Uruguay

Palabras clave: Análisis estadístico Productos químicos

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Matemáticas / Estadística y Probabilidad / Análisis estadístico

Medio de divulgación: Papel

El informe, elaborado a solicitud de PEPSI Uruguay, recoge el estudio estadístico realizado sobre un conjunto de muestras tomadas de la materia prima que adquiere la empresa y de las sustancias que se venden: sales y beveraje base. En algunos casos existen muestreos realizados en el 2004 pero en forma general pertenecen principalmente al 2005 y lo que va del presente año. De dichos muestreos se ha registrado el número de contaminantes sobre el total de kilos inspeccionados, informando el total de partículas encontradas por kilo de muestra y su división en partículas decoloradas (discolored) y extrañas (foreign). Todos los datos analizados en este estudio fueron proporcionados por PEPSI Uruguay de acuerdo a un muestreo por lotes basado en un diseño experimental propio sobre el cuál se realizaron ciertas suposiciones básicas necesarias para llevar adelante el análisis estadístico.

OTRAS PRODUCCIONES

CURSOS DE CORTA DURACIÓN DICTADOS

PATC course: Simulation Environments for Life Sciences (2019)

PABLO D. DANS

Especialización

País: España

Idioma: Inglés

Medio divulgación: Internet

Web: <https://www.bsc.es/es/education/training/patc-courses/patc-course-simulation-environments-life-sciences>

Tipo de participación: Docente

Duración: 1 semanas

Lugar: Barcelona Supercomputing Center

Ciudad: Barcelona

Institución Promotora/Financiadora: Barcelona Supercomputing Center

Escuela de Simulación Computacional Avanzada en Química (2018)

PABLO D. DANS

Especialización

País: Argentina

Idioma: Español

Medio divulgación: Internet

Tipo de participación: Docente

Duración: 2 semanas

Lugar: Argentina

Ciudad: Buenos Aires

Institución Promotora/Financiadora: Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Buenos Aires

PATC course: Simulation Environments for Life Sciences (2018)

PABLO D. DANS

Especialización

País: España

Idioma: Inglés

Medio divulgación: Internet

Web: <https://www.bsc.es/es/education/training/patc-courses/patc-course-simulation-environments-life-sciences>

Tipo de participación: Docente

Duración: 1 semanas

Lugar: Barcelona Supercomputing Center

Ciudad: Barcelona

Institución Promotora/Financiadora: Barcelona Supercomputing Center

Escuela de Simulación Computacional Avanzada en Química (2017)

PABLO D. DANS

Especialización

País: Argentina

Idioma: Español

Medio divulgación: Internet

Tipo de participación: Docente
Duración: 2 semanas
Lugar: Argentina
Ciudad: Buenos Aires
Institución Promotora/Financiadora: Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Buenos Aires

PATC course: Simulation Environments for Life Sciences (2017)

PABLO D. DANS
Especialización
País: España
Idioma: Inglés
Medio divulgación: Internet
Tipo de participación: Docente
Duración: 1 semanas
Lugar: Barcelona Supercomputing Center
Institución Promotora/Financiadora: Barcelona Supercomputing Center

Escuela de Simulación Computacional Avanzada en Química (2016)

ESTRIN, D., CAPECE, L., A. ZEIDA, PABLO D. DANS, TURJANSKY, A., MARTI, M.
Especialización
País: Argentina
Idioma: Español
Medio divulgación: Internet
Tipo de participación: Docente
Duración: 2 semanas
Lugar: Argentina
Ciudad: Buenos Aires
Institución Promotora/Financiadora: Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Buenos Aires
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica computacional

PATC course: Simulation Environments for Life Sciences (2016)

PABLO D. DANS
Especialización
País: España
Idioma: Inglés
Medio divulgación: Internet
Web: <https://www.bsc.es/es/education/training/patc-courses/patc-course-simulation-environments-life-sciences>
Tipo de participación: Docente
Duración: 1 semanas
Lugar: Barcelona Supercomputing Center
Ciudad: Barcelona
Institución Promotora/Financiadora: Barcelona Supercomputing Center

PATC course: Simulation Environments for Life Sciences (2015)

PABLO D. DANS, GELPI, J. LI., HOSPITAL, A., ANDRIO, P., OROZCO, M.
Especialización
País: España
Idioma: Inglés
Medio divulgación: Internet
Web: <https://www.bsc.es/es/education/training/patc-courses/patc-course-simulation-environments-life-sciences>
Tipo de participación: Docente
Duración: 1 semanas
Lugar: Barcelona Supercomputing Center
Ciudad: Barcelona
Institución Promotora/Financiadora: Barcelona Supercomputing Center

AMBER 14 Workshop (2014)

ROITBERG, A., PABLO D. DANS, BATTISTINI, F.

Especialización
País: España
Idioma: Inglés
Medio divulgación: Internet
Tipo de participación: Docente
Duración: 1 semanas
Lugar: España
Ciudad: Barcelona
Institución Promotora/Financiadora: Barcelona Supercomputing Center
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica computacional

Hands-on training in molecular dynamics simulation of coarse-grained nucleic acids at the base-level (2013)

PABLO D. DANS
Especialización
País: Brasil
Idioma: Español
Medio divulgación: Internet
Tipo de participación: Otra
Unidad: Responsable del curso (elaboración del material, dictado y evaluación)
Duración: 2 semanas
Lugar: Brasil
Ciudad: Sao Carlos
Institución Promotora/Financiadora: Depto de Química de la Universidad Federal de Sao Carlos

Computational Modelling and Simulations of Biological Systems (2010)

PANTANO S, PABLO D. DANS, M. MACHADO
Especialización
País: Uruguay
Idioma: Inglés
Medio divulgación: Internet
Tipo de participación: Docente
Duración: 2 semanas
Lugar: Instituto Pasteur de Montevideo
Ciudad: Montevideo
Institución Promotora/Financiadora: Instituto Pasteur de Montevideo, AMSUD-Pasteur, UdelAR
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica computacional

Data Mining en Bioinformática (2007)

PABLO D. DANS, E. Laura Coitiño, NAYA H
Especialización
País: Uruguay
Idioma: Español
Medio divulgación: Internet
Tipo de participación: Docente
Duración: 1 semanas
Lugar: Facultad de Ciencias
Ciudad: Montevideo
Institución Promotora/Financiadora: Instituto de Química Biológica, Facultad de Ciencias (UdelAR)

Bioinformática estructural: Diseño y visualización asistida por PC de la estructura 3D de moléculas y macromoléculas (2006)

E. Laura Coitiño, PABLO D. DANS
Especialización
País: Uruguay
Idioma: Español
Medio divulgación: Internet
Tipo de participación: Docente
Unidad: Educación Permanente
Duración: 1 semanas
Lugar: Facultad de Ciencias
Ciudad: Montevideo

Institución Promotora/Financiadora: Instituto de Química Biológica, Facultad de Ciencias (UdelaR)

Bioinformática estructural: Diseño y visualización asistida por PC de la estructura 3D de moléculas y macromoléculas (2005)

E. Laura Coitiño , PABLO D. DANS

Especialización

País: Uruguay

Idioma: Español

Medio divulgación: Internet

Tipo de participación: Docente

Unidad: Educación Permanente

Duración: 1 semanas

Lugar: Facultad de Ciencias

Ciudad: Montevideo

Institución Promotora/Financiadora: Instituto de Química Biológica, Facultad de Ciencias (UdelaR)

Bioinformática estructural: Diseño y visualización asistida por PC de la estructura 3D de moléculas y macromoléculas (2004)

E. Laura Coitiño , PABLO D. DANS

Especialización

País: Uruguay

Idioma: Español

Medio divulgación: Internet

Tipo de participación: Docente

Unidad: Educación Permanente

Duración: 1 semanas

Lugar: Facultad de Ciencias

Ciudad: Montevideo

Institución Promotora/Financiadora: Instituto de Química Biológica, Facultad de Ciencias (UdelaR)

Bioinformática estructural: Diseño y visualización asistida por PC de la estructura 3D de moléculas y macromoléculas (2003)

E. Laura Coitiño , PABLO D. DANS

Especialización

País: Uruguay

Idioma: Español

Medio divulgación: Internet

Tipo de participación: Docente

Unidad: Educación Permanente

Duración: 1 semanas

Lugar: Facultad de Ciencias

Ciudad: Montevideo

Institución Promotora/Financiadora: Instituto de Química Biológica, Facultad de Ciencias (UdelaR)

Bioinformática estructural: Diseño y visualización asistida por PC de la estructura 3D de moléculas y macromoléculas (2002)

E. Laura Coitiño , PABLO D. DANS

Especialización

País: Uruguay

Idioma: Español

Medio divulgación: Internet

Tipo de participación: Docente

Duración: 1 semanas

Lugar: Facultad de Ciencias

Ciudad: Montevideo

Institución Promotora/Financiadora: Instituto de Química Biológica, Facultad de Ciencias (UdelaR)

PROGRAMAS EN RADIO O TV

Edición de ADN, una puerta que la Ciencia ya abrió (2019)

PABLO D. DANS

Entrevista

País: Uruguay

Idioma: Español
Web: <http://sobreciencia.uy/edicion-del-adn-una-puerta-que-la-ciencia-ya-abrio/>
Emisora: Radio Uruguay 1050
Fecha de la presentación: 23/04/2019
Tema: Programa Sobre Ciencia con Gustavo Villa
Duración: 15 minutos
Ciudad: Montevideo

Investigan el código genético para perfeccionar lo que insumió 500 millones de años de evolución. (2016)

PABLO D. DANS
Entrevista
País: Uruguay
Idioma: Español
Web: <http://www.mec.gub.uy/innovaportal/v/91279/22/mecweb/investigacion-el-codigo-genetico-para-perfeccionar>
Emisora: Radio Uruguay 1050
Fecha de la presentación: 15/08/2016
Tema: Programa Sobre Ciencia con Gustavo Villa
Duración: 15 minutos
Ciudad: Montevideo

Epigenética: el impacto del cambio climático en el futuro de la evolución de la vida (2016)

PABLO D. DANS
Entrevista
País: Uruguay
Idioma: Español
Web: <http://www.mec.gub.uy/innovaportal/v/91274/22/mecweb/epigenetica-el-impacto-del-cambio-climatico-en>
Emisora: Radio Uruguay 1050
Fecha de la presentación: 15/08/2016
Tema: Programa Sobre Ciencia con Gustavo Villa
Duración: 15 minutos
Ciudad: Montevideo

ADN y las simulaciones moleculares (2015)

PABLO D. DANS
Entrevista
País: Uruguay
Idioma: Español
Web: <http://www.mec.gub.uy/innovaportal/v/74014/50/mecweb/gattaca?parentid=11305>
Emisora: Radio Uruguay 1050
Fecha de la presentación: 18/08/2015
Tema: Programa Efecto Mariposa
Duración: 30 minutos
Ciudad: Montevideo

ORGANIZACIÓN DE EVENTOS

Multiscale Simulation of DNA from Electrons to Nucleosomes. 22 years of the Ascona B-DNA Consortium (2022)

PABLO D. DANS
Congreso
Sub Tipo: Organización
Lugar: Suiza ,Ascona Ascona
Idioma: Inglés
Web: <https://www.danslab.xyz/abc2023>
Duración: 1 semanas

RNA and RNA-protein complexes (2014)

PABLO D. DANS
Congreso
Sub Tipo: Organización

Lugar: España ,Hotel Icaria Barcelona
Idioma: Inglés
Medio divulgación: Internet
Duración: 1 semanas
Institución Promotora/Financiadora: Instituto de Investigación Biomédica (IRB Barcelona)

La enseñanza de las ciencias y el ingreso a la Universidad (2004)

PABLO D. DANS
Congreso
Sub Tipo: Organización
Lugar: Uruguay ,Facultad de Ciencias Montevideo
Idioma: Español
Medio divulgación: Internet
Duración: 1 semanas
Institución Promotora/Financiadora: Facultad de Ciencias (UdelaR)

Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina QUITEL (2002)

PABLO D. DANS
Congreso
Sub Tipo: Organización
Lugar: Uruguay ,Radisson Victoria Plaza Montevideo
Idioma: Español
Medio divulgación: Internet
Duración: 1 semanas
Institución Promotora/Financiadora: Facultad de Química (UdelaR) y Facultad de Ciencias (UdelaR)

Evaluaciones

EVALUACIÓN DE PROYECTOS

EVALUACIÓN INDEPENDIENTE DE PROYECTOS

Red Española de Supercomputación (2019)

España
Cantidad: De 5 a 20

ANII - Beca de Posgrado Nacional (2019)

Uruguay
Cantidad: Menos de 5

ANII - Fondo Sectorial de Investigación a partir de datos (2018)

Uruguay
Cantidad: Menos de 5

Fondo Carlos Vaz Ferreira - MEC (2017)

Uruguay
Cantidad: Menos de 5

ANII - Fondo Clemente Estable (2015)

Uruguay
Cantidad: Menos de 5
2015, 2016

Agencia Nacional de Promoción Científica y Tecnológica - ANPCyT (2013)

Argentina
Agencia Nacional de Promoción Científica y Tecnológica - ANPCyT
Cantidad: Menos de 5
Fondo Nacional para la Ciencia y la Tecnología 2013 y 2019

EVALUACIÓN DE PUBLICACIONES

COMITÉ EDITORIAL

Nucleic Acids Research (2013 / 2014)

Cantidad: Menos de 5

Computational Biology and Chemistry (2012 / 2013)

Cantidad: Menos de 5

Physical Chemistry Chemical Physics (2011 / 2013)

Cantidad: Menos de 5

Journal of Biomedicine and Biotechnology (2011 / 2012)

Cantidad: Menos de 5

Journal of Chemical Theory and Computation (2011 / 2013)

Cantidad: De 5 a 20

REVISIONES

BMC Biophysics (2017)

Tipo de publicación: Revista

Cantidad: Menos de 5

Journal Physical Chemistry (2017)

Tipo de publicación: Revista

Cantidad: Menos de 5

Biophysical Journal (2016)

Tipo de publicación: Revista

Cantidad: Menos de 5

Nucleic Acids Research (2016 / 2019)

Tipo de publicación: Revista

Cantidad: De 5 a 20

Nucleus (2016)

Tipo de publicación: Revista

Cantidad: Menos de 5

Biochemistry (2015 / 2016)

Tipo de publicación: Revista

Cantidad: Menos de 5

Journal of the American Statistical Association (2015)

Tipo de publicación: Revista

Cantidad: Menos de 5

Plos ONE (2015)

Tipo de publicación: Revista

Cantidad: Menos de 5

Wiley Interdisciplinary Reviews: Computational Molecular Science (2014)

Tipo de publicación: Revista

Cantidad: Menos de 5

Chemical Physics Letter (2014)

Tipo de publicación: Revista
Cantidad: Menos de 5

Journal of Chemical Theory and Computation (2011 / 2017)

Tipo de publicación: Revista
Cantidad: De 5 a 20

Computational Biology and Chemistry (2011)

Tipo de publicación: Revista
Cantidad: Menos de 5

Physical Chemistry Chemical Physics (2011)

Tipo de publicación: Revista
Cantidad: Menos de 5

Journal of Molecular Modeling (2011)

Tipo de publicación: Revista
Cantidad: Menos de 5

Journal of Chemical Information and Modeling (2011)

Tipo de publicación: Revista
Cantidad: Menos de 5

Journal of Biomolecular Structure and Dynamics (2011)

Tipo de publicación: Revista
Cantidad: Menos de 5

EVALUACIÓN DE EVENTOS Y CONGRESOS

X International Conference on Bioinformatics (2019 / 2019)

Revisiones
Uruguay

Iberoamerican Society of Bioinformatics

1er Workshop Latinoamericano de Modelado Molecular y Simulación Computacional (2016 / 2016)

Revisiones
Argentina

Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Buenos Aires

Computational Modelling and Simulations of Biological Systems (2010)

Revisiones
Uruguay

Miembro del comité de selección de los candidatos para el curso internacional Institut Pasteur de Montevideo - Universidad de la Republica. Miembro del comité de evaluación de la prueba final para la aprobación del curso.

EVALUACIÓN DE CONVOCATORIAS CONCURSABLES

Michele Auger Award (2022 / 2022)

Comité evaluador
Brasil
Cantidad: De 5 a 20

Evaluador del premio internacional Michèle Auger Award, Young Scientists? Independent Research de la revista Biophysical Reviews 2022. Evaluación de 9 candidaturas.

Programa de iniciación a la investigación, CSIC, Udelar (2021 / 2021)

Evaluación independiente
Uruguay

Cantidad: Menos de 5

Programa de posgrado de PEDECIBA Química (2021 / 2021)

Evaluación independiente

Uruguay

Cantidad: Menos de 5

Proyectos de la Comisión Académica de Posgrados (CAP), UdelaR (2020 / 2020)

Evaluación independiente

Uruguay

Cantidad: Menos de 5

Llamados concursables a ayudantes del Lab. de Biomateriales (2006 / 2008)

Uruguay

Cantidad: Menos de 5

Facultad de Ciencias, Universidad de la República.

Miembro de la comisión asesora para los llamados: 091/06 (23/10/2006), 081/07 (11/06/2007), 196/07 (03/12/2007) y 172/08 (01/12/2008).

Llamados concursables a asistentes para la Unidad de Enseñanza (2005 / 2005)

Uruguay

Cantidad: Menos de 5

Facultad de Ciencias, Universidad de la República.

Miembro de la comisión asesora para los llamados: 017/05 (09/05/2005), 094/05 (14/02/2005) y 136/05 (14/02/2005).

Llamados concursables a ayudantes y asistentes para el Servicio Central de Informática (2003 / 2005)

Uruguay

Cantidad: Menos de 5

Facultad de Ciencias, Universidad de la República.

Miembro de la comisión asesora para los llamados: 106/03 (27/10/2003), 107/03 (27/10/2003), 075/04 (15/11/2004), 005/05 (14/03/2005) y 139/05 (07/11/2005).

Llamados concursables a ayudantes del Lab. de Química Teórica y Computacional (2002 / 2009)

Uruguay

Cantidad: Mas de 20

Facultad de Ciencias, Universidad de la República.

Miembro de la comisión asesora para los llamados: 022/02 (08/07/2002), 071/02 (05/08/2002), 067/03 (18/08/2003), 123/03 (10/11/2003), 044/05 (25/04/2005), 045/05 (09/05/2005), 054/05 (09/05/2005), 056/05 (09/05/2005), 104/05 (15/08/2005), 104/06 (20/11/2006), 024/08 (19/05/2008), 025/08 (19/05/2008), 026/08 (19/05/2008), 051/09 (04/05/2009).

JURADO DE TESIS

Doctor en Matemáticas (2022 / 2022)

Jurado de mesa de evaluación de tesis

Sector Extranjero/Internacional/Otros / École polytechnique fédérale de Lausanne (EPFL) / Centro de matemática aplicada , Suiza

Nivel de formación: Doctorado

Miembro del tribunal de tesis doctoral para optar por el título de Doctor en Matemáticas del EPFL, Lausanne, Suiza: Rahul Sharma: "cgNA+: A sequence-dependent coarse-grained model of double-stranded nucleic acids". Presentada por Rahul Sharma. Julio 2022.

Doctorado en Química (2021 / 2021)

Jurado de mesa de evaluación de tesis

Sector Extranjero/Internacional/Otros / Facultad de Ciencias Exactas y Naturales Universidad de Buenos Aires / área Química Inorgánica, Química Analítica y Química Física , Argentina

Nivel de formación: Doctorado

Miembro del tribunal de tesis doctoral para optar por el título de Doctor en el área Química Inorgánica, Química Analítica y Química Física de la Facultad de Ciencias Exactas y Naturales de la Universidad de Buenos Aires: "Simulación multiescala de procesos de larga escala temporal y espacial en proteínas?". Presentada por Lic. Mauro Bringas (Directora Luciana Capece). 19 de febrero 2021.

Doctor en Física (2021 / 2021)

Jurado de mesa de evaluación de tesis

Sector Extranjero/Internacional/Otros / Università degli Studi di Genova / Instituto Italiano de Tecnología , Italia

Nivel de formación: Doctorado

Miembro del tribunal de tesis doctoral para optar por el título de Doctor en Física del Instituto Italiano de Tecnología, Universidad de Génova, Italia: Artemi Bendandi: ?Modelling Electrostatic Interactions and Solvation in Chromatin: From the Single Nucleosome towards the Chromatin Fibre?. Virginia Bazzurro: ?Study of the modulation of GABAA receptors by using RuBi-GABA uncaging with linear and non-linear photoactivation in rat cerebellar granule cells in vitro?. Issota Cainero: ?Nanoscale investigations of chromatin organization by structured illumination microscopy? (Directores Prof. Alberto Diaspro, Dr. Walter Rocchia, Dr. Silvia Dante Luciana Capece). 26 de febrero 2021.

Doctor en Biología (2020 / 2020)

Jurado de mesa de evaluación de tesis

Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Ciencias / PEDECIBA Biología , Uruguay

Nivel de formación: Doctorado

Miembro del tribunal de tesis doctoral para optar por el título de Doctor en Biología (PEDECIBA Biología) de la Facultad de Ciencias ? Universidad de la República: ?Predicción de función de genes mediante aprendizaje automático, con énfasis en el estudio de los patrones de ubicación de grupos funcionales de genes.?. Presentada y defendida por MSc. Flavio Pazos (Director Rafael Cantera). IIBCE 4 de setiembre 2020.

Magíster en Química (2020 / 2020)

Jurado de mesa de evaluación de tesis

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

Nivel de formación: Maestría

Presidente del tribunal de tesis de maestría para optar por el título de Magíster en Química (PEDECIBA Química) de la Facultad de Química ? Universidad de la República: ?Nitronas como potenciales fármacos neuroprotectores para el tratamiento de la Enfermedad de Alzheimer: un abordaje multidisciplinario?. Presentada y defendida por la Lic. Saira Cancela (Directores Alicia Merlino, Paola Hernández, María Laura Lavaggi, Patricia Lagos). IIBCE 23 de noviembre 2020.

Doctorado del área de Química Inorgánica, Química Analítica y Química Física, (2019 / 2019)

Jurado de mesa de evaluación de tesis

Sector Extranjero/Internacional/Otros / Facultad de Ciencias Exactas y Naturales Universidad de Buenos Aires / Departamento de Química Inorgánica, Química Analítica y Química Física , Argentina

Nivel de formación: Doctorado

Jurado del trabajo de Tesis Doctoral de la LAJA JULIO PLANA, que contó con la Dra. Luciana Capece como Directora de Tesis, titulado: "Estudio computacional multiescala de procesos dinámicos en hemoproteínas", constituido por los siguientes miembros:

Maestría en Bioinformatics for Health Sciences (2017 / 2018)

Jurado de mesa de evaluación de tesis

Sector Extranjero/Internacional/Otros / Universitat Pompeu Fabra , España

Nivel de formación: Maestría

Evaluador del programa de estudios y del trabajo final para optar por el título de Máster de Bioinformatics for Health Sciences, de la Universitat Pompeu Fabra de Barcelona: ?Structural and dynamics analysis of pyruvate kinase from erythrocytes. Implications in pathology?. Presentada por Luis Jordà (Director JL Gelpí). Noviembre 2017 - Junio 2018.

Maestría del PEDECIBA area Biología subarea Biofísica (2010 / 2010)

Jurado de mesa de evaluación de tesis

Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Ciencias / Departamento de Ciencias Biológicas , Uruguay

Nivel de formación: Maestría

Evaluador del programa de estudios para optar por el título de Master del Programa de Desarrollo de las Ciencias Básicas (PEDECIBA) área Biología subárea Biofísica: ?Desarrollo de un modelo simplificado de solvente acuoso para uso en simulaciones de dinámica molecular?, presentado por el

Formación de RRHH

TUTORÍAS CONCLUIDAS

POSGRADO

Diseño racional in silico de biocatalizadores: aplicación a la obtención de radiotrazadores de uso en diagnóstico PET (2021 - 2023)

Tesis de maestría
Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química / Maestría en Química , Uruguay
Programa: Maestría en Química
Tipo de orientación: Cotutor en pie de igualdad (PABLO D. DANS , PAOLA PANIZZA)
Nombre del orientado: Ariel Tijman
País: Uruguay

Bioinformática estructural aplicada al estudio del ARN (2017 - 2022)

Tesis de doctorado
Sector Extranjero/Internacional/Otros / Instituto de Investigacion Biomedica Barcelona , España
Programa: Doctorado en Biomedicina con especialización en Bioinformatica, Universidad de Barcelona
Tipo de orientación: Cotutor en pie de igualdad (PABLO D. DANS)
Nombre del orientado: Diego Gallego
País: España
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica computacional

Chromosomes and Chromatin modeling (2014 - 2019)

Tesis de doctorado
Sector Extranjero/Internacional/Otros / Universidad de Barcelona , España
Programa: Doctorado en Biología
Tipo de orientación: Asesor
Nombre del orientado: Diana Buitrago
País: España
Palabras Clave: Estructura de cromosomas Territorios Cromatina activa/inactiva Simulaciones coarse grain
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica computacional

The RNA conformational landscape: Studying the backbone through eta-theta glasses

Tesis de maestría
Sector Extranjero/Internacional/Otros / Universidad Autonoma de Barcelona , España
Programa: Bioinformatica
Tipo de orientación: Cotutor en pie de igualdad
Nombre del orientado: Diego Gallego
País: España
Palabras Clave: Espacio conformacional ARN Interacción ARN-proteinas conformational selection induced fit
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica computacional

Extensive MD simulations in the microsecond timescale of B-DNA in different environments

Tesis de maestría
Sector Extranjero/Internacional/Otros / University of East Anglia , Inglaterra
Programa: Year in the industry
Tipo de orientación: Tutor único o principal
Nombre del orientado: Linda Danilane
País: Inglaterra
Palabras Clave: interacción ADN-cationes parametros de campos de fuerzaciones divalentes y monovalentes
Areas de conocimiento:

Development of coarse-grained DNA and chromatin models

Tesis de doctorado
Sector Extranjero/Internacional/Otros / Universidad de Barcelona , España
Tipo de orientación: Cotutor en pie de igualdad
Nombre del orientado: Jurgen Walther
País: España
Palabras Clave: Modelos Multiescala Modelización matemática de moléculas Nucleosomas
Hamiltonianos clásicos Simulaciones Monte Carlo
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica computacional

Computational studies of perturbation response and information transfer in nucleic acids

Tesis de doctorado
Sector Extranjero/Internacional/Otros / Universidad de Barcelona , España
Tipo de orientación: Cotutor en pie de igualdad
Nombre del orientado: Alexandra Balaceanu
País: España
Palabras Clave: Molecular dynamics Allostery DNA mechanical properties
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Simulaciones Biomoleculares

Modelado Molecular de Procesos Relacionados a la Transcripción del Virus VIH-1

Tesis de doctorado
Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Ciencias , Uruguay
Programa: Doctorado en Ciencias Biológicas (UDELAR-PEDECIBA)
Nombre del orientado: Matias Rodrigo Machado
País: Uruguay
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica teórica

Diseño racional de péptidos represores/activadores de la transcripción del VIH-1 (se solicitó pasaje a doctorado)

Tesis de maestría
Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Ciencias , Uruguay
Programa: Maestría en Biofísica
Nombre del orientado: Matias Rodrigo Machado
País: Uruguay
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica teórica

GRADO

Mismatch detection mechanism of the MutS

Tesis/Monografía de grado
Sector Extranjero/Internacional/Otros / Universidad de Barcelona , España
Programa: Bioquímica
Tipo de orientación: Tutor único o principal
Nombre del orientado: Oriol Gracia Carmona
País: España
Palabras Clave: Dinámica Molecular mutaciones en ADN reconocimiento molecular energía libre de binding
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica computacional

Estructura y la dinámica de los Kissing-hairpins de ARN

Tesis/Monografía de grado
Sector Extranjero/Internacional/Otros / Universidad de Barcelona , España
Programa: Biotecnología
Tipo de orientación: Tutor único o principal
Nombre del orientado: Adria Fernandez
País: España

Palabras Clave: Simulaciones de Dinamica Molecular Energia libra de union Interacción ARN-cationes

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica computacional

Desarrollo de un modelo simplificado para la simulación de ADN

Tesis/Monografía de grado

Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Ciencias , Uruguay

Programa: Licenciatura en Bioquímica

Nombre del orientado: Ari Zeida

País: Uruguay

Palabras Clave: Molecular dynamics Coarse-grained force field Physical properties of DNA

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica teórica

Efectos de la glicación del residuo K16 sobre la estructura y propiedades fisicoquímicas del fragmento 10-35 del péptido beta-amiloide

Tesis/Monografía de grado

Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Ciencias , Uruguay

Programa: Licenciatura en Bioquímica

Nombre del orientado: Tamara Meirelles

País: Uruguay

Palabras Clave: modelado cuántico y QM/MM Simulaciones moleculares Glicación de peptidos

Desarrollo de Parámetros

Areas de conocimiento:

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

Electroquímica / Química Computacional

Co-Tutor/Asesor/Orientador. Tutor principal: Dra. Laura Coitiño, Lab. de Química Teórica y

Computacional - Facultad de Ciencias - UDELAR. Aprobado con 11/12.

OTRAS

Parameters development for all-atom simulations of Cytosine's epigenetic modifications

Otras tutorías/orientaciones

Sector Extranjero/Internacional/Otros / Instituto de Investigacion Biomedica Barcelona , España

Tipo de orientación: Cotutor en pie de igualdad

Nombre del orientado: Jana Terenavo

País: España

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica computacional

Desarrollo de un algoritmo de ajuste entre microscopía STORM y modelos mesoscópicos

Iniciación a la investigación

Sector Extranjero/Internacional/Otros / Instituto de Investigacion Biomedica Barcelona , España

Tipo de orientación: Tutor único o principal

Nombre del orientado: Pablo Romero

País: España

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica computacional

Desarrollo de un método para la determinación de transiciones conformacionales entre segmentos de cromatina

Iniciación a la investigación

Sector Extranjero/Internacional/Otros / Instituto de Investigacion Biomedica Barcelona , España

Tipo de orientación: Cotutor en pie de igualdad

Nombre del orientado: Eder Rodriguez

País: España

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica computacional

Theoretical and Experimental Studies on LYS/ARG-DNA interactions

Otras tutorías/orientaciones

Sector Extranjero/Internacional/Otros / Instituto de Investigacion Biomedica Barcelona , España

Tipo de orientación: Tutor único o principal
Nombre del orientado: Benjamin Martin
País: España
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica computacional

Modelado de Manganese peroxidasas extraídas de hongos

Otras tutorías/orientaciones
Sector Extranjero/Internacional/Otros / Instituto de Investigación Biomedica Barcelona , España
Tipo de orientación: Tutor único o principal
Nombre del orientado: Gabriela da Rosa
País: España
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica computacional

Desarrollo de una interfaz gráfica para problemas de bioinformática estructural

Otras tutorías/orientaciones
Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Ingeniería / Trabajo final para optar por el título de Ingeniero de Sistemas , Uruguay
Tipo de orientación: Cotutor en pie de igualdad
Nombre del orientado: Ignacio Barreto, Daniel Pons, Rodrigo Porteira
País: Uruguay
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Computación

Estudio Teórico de la interacción de Complejos de Oro y Amino-glucósidos con Nucleótidos de ARN del VIH

Otras tutorías/orientaciones
Sector Extranjero/Internacional/Otros / Instituto de Investigación Biomedica Barcelona , España
Tipo de orientación: Tutor único o principal
Nombre del orientado: Pedro Francisco Santiago
País: España
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica computacional

Structural and dynamical studies of the ribosomal A-Site

Otras tutorías/orientaciones
Sector Extranjero/Internacional/Otros / , Alemania
Tipo de orientación: Tutor único o principal
Nombre del orientado: Fabian Keller
País: Alemania
Palabras Clave: Dinámica Molecular A-site de bacteria vs humano efecto de drogas y cationes
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica computacional

Simulation of RNA Tetraloops

Iniciación a la investigación
Sector Extranjero/Internacional/Otros / Instituto de Investigación Biomédica Barcelona / Departamento de Biología Estructural y Computacional , España
Tipo de orientación: Tutor único o principal
Nombre del orientado: Fernando Romeo
País: España
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica computacional

Impact of non-canonical pairing and mismatches on DNA structure and dynamics

Orientación de posdoctorado
Sector Extranjero/Internacional/Otros / Instituto de Investigación Biomedica Barcelona , España
Tipo de orientación: Cotutor en pie de igualdad
Nombre del orientado: Guilia Rosseti
País: España
Áreas de conocimiento:

Tutorías del reglamento 2000 de la Licenciatura en Bioquímica

Otras tutorías/orientaciones

Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Ciencias , Uruguay

Nombre del orientado: Mariana Pegazzano

País: Uruguay

Palabras Clave: Biología molecular Inmunología

Areas de conocimiento:

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

TUTORÍAS EN MARCHA

POSGRADO

Ingeniería in silico y experimental de aminosas reductivas: aplicación a la obtención de radiotrazadores para el diagnóstico PET de enfermedades neurodegenerativas (2021)

Tesis de maestría

Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Ciencias / Maestría en Biotecnología , Uruguay

Programa: Biotecnología

Tipo de orientación: Cotutor en pie de igualdad (PABLO D. DANS , RODRÍGUEZ GIORDANO, S.)

Nombre del orientado: Gonzalo Lopez

País/Idioma: Uruguay,

Desarrollo de un modelo de grano grueso para la simulación nanoscópica y mesoscópica de ADN y cromatina (2019)

Tesis de doctorado

Sector Educación Superior/Público / Programa de Desarrollo de las Ciencias Básicas / Área Química (PEDECIBA) , Uruguay

Programa: Posgrado - PEDECIBA

Tipo de orientación: Tutor único o principal

Nombre del orientado: Gabriela da Rosa

País/Idioma: Uruguay,

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica computacional

Co-dirigido con la Prof. Dra. Gianna Cecchetto. Hubo un cambio de programa de Doctorado de la candidata da Rosa.

GRADO

Evaluación de aptámeros anti-HER2 como posibles biofármacos en cáncer de mama (2022)

Tesis/Monografía de grado

Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Ciencias / Licenciatura en Cs Biológicas , Uruguay

Programa: Licenciatura en Ciencias Biológicas

Tipo de orientación: Cotutor

Nombre del orientado: Mauro de Castro

País/Idioma: Uruguay,

OTRAS

Bioinformática estructural de RNA (2020)

Orientación de posdoctorado

Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Centro Universitario Regional Litoral Norte / Departamento de Ciencias Biológicas , Uruguay

Programa: CENUR Litoral Norte - Salto

Tipo de orientación: Tutor único o principal

Nombre del orientado: Leandro Grille

País/Idioma: Uruguay,

TUTORÍAS DESISTIDAS

POSGRADO

A study about genetic, activity and structure of cannabinoid synthesis from Cannabis (2019)

Tesis de maestría
Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Ciencias / PEDEBICA Biología, Uruguay
Programa: Programa de desarrollo de Ciencias Básicas (PEDECIBA)
Tipo de orientación: Cotutor en pie de igualdad (PABLO D. DANS)
Nombre del orientado: Leticia Chao
Medio de divulgación: Otros
País/Idioma: Uruguay, Español
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica computacional
Co-director con la Dra. Astrid Agorio

Ingeniería y rediseño de Manganese Peroxidasas de hongos (2019)

Tesis de doctorado
Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química / PEDECIBA Química, Uruguay
Programa: Programa de Desarrollo de Ciencias Básicas (PEDECIBA)
Tipo de orientación: Cotutor en pie de igualdad (PABLO D. DANS)
Nombre del orientado: Gabriela da Rosa
País/Idioma: Uruguay, Español
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica computacional
Co-dirección con Gianna Cecchetto

Otros datos relevantes

PREMIOS, HONORES Y TÍTULOS

Artículo seleccionado ?artículo del mes? por la Sociedad de Biofísica de España (mayo 2019) (2019)

(Nacional)
Sociedad de Biofísica de España
Artículo seleccionado ?artículo del mes? por la Sociedad de Biofísica de España (mayo 2019, enlace: <http://biofisica.info/modulation-of-the-helical-properties-of-dna-next-to-nearest-neighbour-effects-and-beyond/>). Balaceanu Alexandra, Biutrago Diana, Walther Jurgen, Dans Pablo D., Orozco Modesto. Modulation of the Helical Properties of DNA: Next-To-Nearest Neighbour Effects and Beyond. Nucleic Acids Research, DOI: 10.1093/nar/gkz255, (2019).

Artículo seleccionado como altamente relevante por Faculty of 1000 (F1000) (2018)

(Internacional)
F1000
Artículo seleccionado como altamente relevante por Faculty of 1000 (F1000), año 2018 (Allewell N: F1000Prime Recommendation, 01 Oct 2018; 10.3410/f.733651644.793550112, <https://f1000.com/prime/733651644>). Elizabeth Sweeny, Anuradha Singh, Ritu Chakravarti, Osiris Martinez-Guzman, Arushi Saini, Mohammad Haque, Greer Garee, Pablo D. Dans, Luciana Hannibal, Amit Reddi, and Dennis Stuehr. Glyceraldehyde 3-phosphate dehydrogenase is a chaperone that allocates labile heme in cells. JBC. DOI: 10.1074/jbc.RA118.004169, (2018).

Artículo seleccionado en 2018 y comentado por los editores del JBC (2018)

(Internacional)
Journal of Biological Chemistry
Artículo seleccionado en 2018 y comentado por los editores del JBC (JBC editors? pick highlight: Angela S. Fleischhacker and X Stephen W. Ragsdale. An unlikely heme chaperone confirmed at last. DOI 10.1074/jbc.H118.005247). Elizabeth Sweeny, Anuradha Singh, Ritu Chakravarti, Osiris Martinez-Guzman, Arushi Saini, Mohammad Haque, Greer Garee, Pablo D. Dans, Luciana Hannibal, Amit Reddi, and Dennis Stuehr. Glyceraldehyde 3-phosphate dehydrogenase is a chaperone that allocates labile heme in cells. JBC. DOI: 10.1074/jbc.RA118.004169, (2018).

Artículo seleccionado ?artículo del mes? por la Sociedad de Biofísica de España (octubre 2018) (2018)

(Nacional)

Sociedad de Biofísica de España

Artículo seleccionado ?artículo del mes? por la Sociedad de Biofísica de España (octubre 2018, enlace: <http://biofisica.info/allsterism-and-signal-transfer-in-dna/>). Balaceanu Alexandra, Pérez Alberto, Dans Pablo D., and Orozco Modesto. Allsterism and Signal Transfer in DNA. Nucleic Acids Research, DOI: 10.1093/nar/gky549, (2018).

29. Artículo seleccionado en 2018 por el Barcelona Supercomputing Center (BSC) como caso de éxito en su reporte anual 2017 (2018)

(Nacional)

Barcelona Supercomputing Center

Artículo seleccionado en 2018 por el Barcelona Supercomputing Center (BSC) como caso de éxito en su reporte anual 2017 (PRACE 9th Call): Wave of perturbation: Protein-DNA binding allostery. http://www.prace-ri.eu/IMG/pdf/Prace-Annual-Report2017_LOWRES.pdf (pp. 20). Balaceanu Alexandra, Pérez Alberto, Dans Pablo D., and Orozco Modesto. Allsterism and Signal Transfer in DNA. Nucleic Acids Research, DOI: 10.1093/nar/gky549, (2018).

Artículo seleccionado ?artículo del mes? por la Sociedad de Biofísica de España (abril 2017) (2017)

(Nacional)

Sociedad de Biofísica de España

Artículo seleccionado ?artículo del mes? por la Sociedad de Biofísica de España (abril 2017), enlace: <http://biofisica.info/how-accurate-are-accurate-force-fields-for-b-dna/>). Dans, Pablo D., Ivani Ivan, Hospital Adam, Portella Guillem, González Carlos, Orozco Modesto. How accurate are accurate force-fields for B-DNA? Nucleic Acids Research (2017). DOI: 10.1093/nar/gkw1355.

Artículo seleccionado como trabajo destacado del IRB (Barcelona) en su reporte anual 2017 (2017)

(Nacional)

Instituto de Investigación Biomédica (IRB Barcelona)

Artículo seleccionado como trabajo destacado del IRB (Barcelona) en su reporte anual 2017 (<https://www.irbbarcelona.org/annualreport2017/#selected-publications>). Dans, Pablo D., Ivani Ivan, Hospital Adam, Portella Guillem, González Carlos, Orozco Modesto. How accurate are accurate force-fields for B-DNA? Nucleic Acids Research (2017). DOI: 10.1093/nar/gkw1355.

Artículo seleccionado "artículo del mes" por la Sociedad de Biofísica de España (enero 2016) (2016)

(Nacional)

Sociedad de Biofísica de España

Artículo seleccionado "artículo del mes" por la Sociedad de Biofísica de España (enero 2016, enlace: <http://biofisica.info/ivani-orozco-nat-methods-13-55/>). Ivani, Ivan, Dans Pablo D., Noy Agnes, Pérez Alberto, Faustino Ignacio, Hospital Adam, Walther Jurgen, Andrio Pau, Goni Ramon, Balaceanu Alexandra, et al. Parmbsc1: a refined force field for DNA simulations. Nature Methods, Volume 13, Issue 1, 55-8, (2016).

Artículo señalado como altamente relevante por Faculty of 1000 (F1000) (2016)

(Internacional)

F1000

Artículo señalado como altamente relevante por Faculty of 1000 (F1000), año 2016 (<https://f1000.com/prime/725939551>). Ivani, Ivan, Dans Pablo D., Noy Agnes, Pérez Alberto, Faustino Ignacio, Hospital Adam, Walther Jurgen, Andrio Pau, Goni Ramon, Balaceanu Alexandra, et al. Parmbsc1: a refined force field for DNA simulations. Nature Methods, Volume 13, Issue 1, 55-8, (2016).

Artículo seleccionado ?artículo del mes? por la Sociedad de Biofísica de España (mayo 2016) (2016)

(Nacional)

Sociedad de Biofísica de España

Artículo seleccionado ?artículo del mes? por la Sociedad de Biofísica de España (mayo 2016, enlace: <http://biofisica.info/dans-orozco-nucleic-acids-res-44-4052/>). Dans Pablo D., Danil?ne L., Ivani Ivan, Dr?ata Tomá?, Lanka? Filip, Hospital Adam, Walther Jürgen, Illa Pujagut Ricard, Battistini Federica, Gelpí Josep Lluís, Lavery Ricard and Orozco Modesto. Long-timescale dynamics of the Drew-Dickerson dodecamer. Nucleic Acids Research, 44(9): 4052-4066, (2016)

Premio al mejor trabajo en la modalidad poster en el Congreso RNA Structure, Dynamics and Function (2016)

(Internacional)

SISSA, Trieste, Italia.

Premio al mejor trabajo en la modalidad poster en el Congreso RNA Structure, Dynamics and Function. Título del trabajo: "Looking at RNA through "glasses". SISSA, Trieste, Italia. 24 a 27 de mayo 2016.

Premio al mejor trabajo en formato poster en el Congreso New Trends in Computational Chemistry for Industry Applications (2015)

(Nacional)

Catalonian Reference Network on Theoretical and Computational Chemistry (XRQTC)

Premio al mejor trabajo en formato poster en el Congreso New Trends in Computational Chemistry for Industry Applications, Barcelona, España. Octubre 2015. Título del trabajo "Towards multiscale modelling of sequence specific properties of chromatin?". Organizado por la Catalonian Reference Network on Theoretical and Computational Chemistry (XRQTC).

Premio a la mejor presentación oral en el First IRB Barcelona PostDoc Day (2014)

(Nacional)

Instituto de Investigación Biomédica (IRB Barcelona)

Premio a la mejor presentación oral en el First IRB Barcelona PostDoc Day: "A Talk with Siméon and Ludwig: Direct Measurement of the Dielectric Polarization Properties of DNA?". 3 de abril 2014, Barcelona, España.

Profesor invitado Universidad Federal de Sao Carlos, Brasil (2013)

(Internacional)

Universidad Federal de Sao Carlos

Invitado al departamento de química de la UFScar para dictar un curso teórico-práctico: "Hands-on training in molecular dynamics simulation of coarse-grained nucleic acids at the base-level" para 9 estudiantes de posgrado; y una charla para el departamento: "Exploring and Unravelling B-DNA polymorphisms in B-DNA helical conformations".

highly significant F1000 publication (2012)

(Internacional)

Faculty of F1000

Faculty of F1000 is a post-publication peer-review service that provides online evaluations of recently published research articles. A 'Faculty' of over 10,000 distinguished scientists from around the globe identify, evaluate and rate the most significant articles from biomedical research publications. Otorgado por: Exploring polymorphisms in B-DNA helical conformations Dans, P., Pérez, A., Faustino, I., Lavery, R. and Orozco, M. Nucleic Acids Research (2012) 10.1093/nar/gks884.

Investigador Nivel I (2011)

(Nacional)

SNI - ANII

Ascendido al Nivel 1 del Sistema Nacional de Investigadores de la ANII en la evaluación 2010. Pasaje al estado de Investigador Asociado en marzo 2011 por recibir fuera del país durante el período 2011-2012 para llevar a cabo una estancia posdoctoral en el Instituto de Investigación Biomédica de Barcelona.

Premio al mejor trabajo presentado (2011)

(Internacional)

Asociación Argentina de Bioinformática y Biología Computacional

Premio al mejor poster: "Ion-induced DNA conformational changes explored in the microsecond time scale by coarse-grain molecular dynamics simulations". Autores: Darré, L., Dans, P. D., Pantano, S. En el segundo congreso de la A2B2C, Córdoba, Argentina.

Mención al mejor trabajo presentado en la 1st Argentinean Congress of Bioinformatics and Computational Biology, Buenos Aires, Argentina. (2010)

(Internacional)

A2B2C (Asociación Argentina de Bioinformática y Biología Computacional)

Beca para asistir al International Conference on Molecular Aspects of Cell Biology: A Perspective from Computational Physics, Trieste, Italia. (2010)

(Internacional)

Premio al trabajo presentado más destacado (2010)

(Internacional)
International Center for Theoretical Physics

Investigador Grado 3 (2010)

(Nacional)
PEDECIBA QUIMICA
Ingreso como investigador Grado 3 al Programa de Desarrollo de las Ciencias Básicas área Química (Ministerio de Educación y Cultura - Universidad de la República - Programa de las Naciones Unidas para el Desarrollo), abril 2010.

Beca para asistir al VII Iberoamerican Congress of Biophysics y al II Latin American Postgraduate Program of Biophysics Course (2009)

(Internacional)
Sociedad Argentina de Biofísica, Sociedad Brasileira de Biofísica, UIPAB

Premio al trabajo más destacado presentado (2009)

(Internacional)
VII Iberoamerican Congress of Biophysics
DEVELOPMENT OF A COARSE-GRAINED MODEL AT THE BASE-LEVEL FOR DNA Pablo D. Dans, Ari Zeida & Sergio Pantano Abstract All-atoms molecular dynamics (MD) simulations are a very powerful tool to predict structural, dynamical, and thermodynamical properties of biological molecules. Nevertheless the current computational power constrains this analysis to time scales of a few hundreds of nanoseconds, too short to follow several important biological processes. In addition, the number of degrees of freedom of biological systems is very large, and an appropriate phase space exploration of large length scales biological molecules is not feasible. To bridge the gap between times scales of practicable simulations and those of biologically relevant motions and also fill the lack between a microscopic representations of biomolecules to mesoscopic length scales, several simplified methods have been proposed. One type of such methods are based on a coarse-grained (CG) representation of the all-atoms system in which the potential energy is expressed in terms of harmonic springs between spatially close effective centroids representing functional groups or residues in biomolecules. While adequate representations of DNA exist at the atomic and continuum level, there is a relative lack of models capable of describing its behavior at mesoscopic length scales. In this contribution we present a mesoscale model of DNA that reduces the complexity of each nucleotide to six interactions sites. Intra and inter molecular interactions are evaluated using a classical Hamiltonian with explicit electrostatics calculated under the Generalized Born framework. Several properties calculated with our CG model, such as temperature-dependend melting and structural transitions (A→B) agree well with experimental and/or MD data with significantly less computational efforts.

Candidato a Investigador (2009)

(Nacional)
Agencia Nacional de Investigación e Innovación
Ingreso al Sistema Nacional de Investigadores en la categoría "Candidato a Investigador" durante el año 2009.

Beca para asistir al International Conference on Drug Design and Discovery for Developing Countries, Trieste, Italia. (2008)

(Internacional)
Naciones Unidas (ICS-UNIDO)

Beca Doctoral (2005)

(Nacional)
Facultad de Química / Proyectos institucionales

Beca para asistir al International Theoretical Chemistry Congress in Latin Language (QUITEL),

Caxambu, Brasil (2000)
(Internacional)
Organización del congreso

PRESENTACIONES EN EVENTOS

3era reunión anual del Club del RNA del Uruguay (2019)

Encuentro
Modeling, simulations, and bioinformatics at the service of RNA structure and dynamics
Uruguay
Tipo de participación: Conferencista invitado
Carga horaria: 6
Nombre de la institución promotora: Club del RNA del Uruguay - IIBCE

Seminarios del Instituto de Química Biológica, FC-UdelaR (2018)

Seminario
Linking chromatin structure, chromosome conformation, and gene regulation
Argentina
Tipo de participación: Conferencista invitado
Carga horaria: 6
Nombre de la institución promotora: Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Buenos Aires

Seminarios del del Instituto de Investigaciones Biológicas Clemente Estable (IIBCE) (2018)

Seminario
From optical microscopy to near atomic resolution of genes and chromosomes
Uruguay
Tipo de participación: Conferencista invitado
Carga horaria: 6
Nombre de la institución promotora: Instituto de Investigaciones Biológicas Clemente Estable

Seminarios de la Facultad de Química (2018)

Seminario
Modeling DNA from the electron to the chromosome
Uruguay
Tipo de participación: Conferencista invitado
Carga horaria: 6
Nombre de la institución promotora: Facultad de Química, UdelaR

Seminarios del Departamento de Ciencias Biológicas del CENUR Regional Norte (2018)

Seminario
Talk with Siméon, Ludwig and Doofenshmidt: Direct Measurement of the Dielectric Polarization Properties of DNA
Uruguay
Tipo de participación: Conferencista invitado
Carga horaria: 12
Nombre de la institución promotora: Departamento de Ciencias Biológicas del CENUR Regional Norte (UdelaR)

Seminarios del Departamento de Química Inorgánica, Analítica y Química Física (FCEyN-UBA) (2018)

Seminario
tRNAsaurus Rex and the Frozen Genetic Code
Argentina
Tipo de participación: Conferencista invitado
Carga horaria: 6
Nombre de la institución promotora: Departamento de Química Inorgánica, Analítica y Química Física (FCEyN-UBA)

Seminarios del Instituto de Biología Molecular de Montpellier (2017)

Seminario
Modeling DNA from the electron to the chromosome
Francia

Tipo de participación: Conferencista invitado
Carga horaria: 6
Nombre de la institución promotora: Instituto de Biología Molecular de Montpellier

Seminarios del Departamento de Química Biológica, FCEyN-UBA (2017)

Seminario
Deciphering the conformational code behind the indirect reading of DNA sequences
Argentina
Tipo de participación: Conferencista invitado
Carga horaria: 6
Nombre de la institución promotora: Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Buenos Aires

Seminarios Facultad de Agronomía (2016)

Seminario
tRNAsaurus Rex and the Frozen Genetic Code
Uruguay
Tipo de participación: Conferencista invitado
Carga horaria: 2
Nombre de la institución promotora: Departamento de Bioquímica de la Facultad de Agronomía (UdelaR) Palabras Clave: Simulaciones Estructura de tRNA evolucion del codigo genetico
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica computacional, bioquímica y biología molecular

1er Workshop Latinoamericano de Modelado Molecular y Simulación Computacional (2016)

Taller
A Talk with Siméon, Ludwig and Doofenshmidt: Direct Measurement of the Dielectric Polarization Properties of DNA
Argentina
Tipo de participación: Conferencista invitado
Carga horaria: 8
Nombre de la institución promotora: Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Buenos Aires Palabras Clave: Simulaciones constante dielectrica poisson-boltzmann propiedades fisicas del ADN
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica

Seminarios de Instituto (IPMONT) (2016)

Seminario
Ode to the code and the conundrum of life
Uruguay
Tipo de participación: Conferencista invitado
Carga horaria: 2
Nombre de la institución promotora: Instituto Pasteur de Montevideo Palabras Clave: Simulaciones Estructura de tRNA evolucion codigo genetico
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica computacional, bioquímica y biología molecular

Seminarios del Instituto de Química Biológica, FC-UdelaR (2015)

Seminario
A talk with Siméon, Ludwig Edward and Doofenshmidt: Direct measurement of the dielectric properties of DNA
Uruguay
Tipo de participación: Conferencista invitado
Carga horaria: 2
Nombre de la institución promotora: Instituto de Química Biológica, Facultad de Ciencias (UdelaR) Palabras Clave: Simulaciones constante dielectrica poisson-boltzmann
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica

Seminarios del Computational Biomedicine, Forschungszentrum Jülich (2015)

Seminario

Direct measurement of the dielectric properties of DNA & parmBSC1 a refined force-field for DNA simulations

Alemania

Tipo de participación: Conferencista invitado

Carga horaria: 8

Nombre de la institución promotora: Computational Biomedicine, Forschungszentrum Jülich

Palabras Clave: Dinámica Molecular constante dielectrica desarrollo de campos de fuerza propiedades físicas del ADN

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica computacional

Seminarios de Instituto (IPMONT) (2015)

Seminario

Structural polymorphisms in B-DNA helical conformations: Origins and causes

Uruguay

Tipo de participación: Conferencista invitado

Carga horaria: 2

Nombre de la institución promotora: Instituto Pasteur de Montevideo Palabras Clave: Dinámica

Molecular datamining de bases de datos espacio conformacional ADN Estructuras de Rxy

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica computacional

Seminarios Facultad de Agronomía (2015)

Seminario

The structural impact of DNA mismatches: a Molecular Dynamics and NMR study

Uruguay

Tipo de participación: Conferencista invitado

Carga horaria: 2

Nombre de la institución promotora: de Bioquímica de la Facultad de Agronomía (UdelaR) Palabras

Clave: ADN dañado mutaciones perturbaciones en el espacio helicoidal

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica computacional

Seminarios Departamento de Química - UFSCar (2013)

Seminario

Exploring and unraveling B-DNA polymorphisms in helical conformations

Brasil

Tipo de participación: Conferencista invitado

Carga horaria: 2

Nombre de la institución promotora: Departamento de Química de la Universidad de Federal de

Sao Carlos Palabras Clave: espacio conformacional ADN bases de datos estructurales

polimorfismos estructurales

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica computacional

Seminarios del grupo de Molecular Modeling & Bioinformatics (IRB Barcelona) (2010)

Seminario

Hybrid-hybrid models for the simulation of DNA in near physiological conditions

España

Tipo de participación: Conferencista invitado

Carga horaria: 2

Nombre de la institución promotora: MMB - Universidad de Barcelona Palabras Clave: Coarse-

grain Molecular dynamics nucleic acids

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica computacional

Seminarios Departamento de Química - Universidad de Girona (2010)

Seminario

Hybrid All-Atom/Coarse-Grain Models for DNA Simulations in Implicit and Explicit Solvents

España

Tipo de participación: Conferencista invitado

Carga horaria: 6

Nombre de la institución promotora: Universidad de Girona Palabras Clave: Coarse-grain
Molecular dynamics nucleic acids

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica computacional

CONSTRUCCIÓN INSTITUCIONAL

CONSTRUCCION INSTITUCIONAL:

- Creación del Grupo de Biofísica Computacional en el CENUR Litoral Norte, sede Salto. 2020 a la fecha. El grupo cuenta actualmente con 6 integrantes, 5 de los cuales obtuvieron becas o son financiados por proyectos del Grupo.

- Creación de la Subcomisión de Comunicación Académica del CENUR Litoral Norte. Propuse la creación de dicha comisión que presido desde inicios del 2021. La SCA se encarga de organizar los seminarios de Departamento de Ciencias Biológicas - DCB (no se hacían previamente), la confección y mantenimiento de la Web (<https://www.dcb.litoralnorte.udelar.edu.uy/>) y todas las comunicaciones a través de las redes sociales. También se encarga de actividades como la semana de la ciencia (2022) y otros eventos de puertas abiertas del DCB.

- Generación y co-responsable de un centro interdisciplinario financiado por el Espacio Interdisciplinario de la Udelar (2021-2025). CEIBOS: Centro de Estudios Interdisciplinarios de Biodiversidad Orientado a aplicaciones en Salud. Se trata de un centro que reúne cerca de 50 investigadores de la Udelar y que es dirigido por la Dra Rodríguez (Fac. Química), el Dr. Testuri (Fac. Ingeniería) y Dr. Dans (CENUR LN).

MEMBRECIAS:

1. Miembro activo Gdo. 3 (setiembre 2019 a la fecha) del Programa de Desarrollo de las Ciencias Básicas (PEDECIBA Química, Uruguay). Antes Gdo. 3 activo (2010-2011), y asociado (2011-2019).
2. Miembro activo Nivel 1 (agosto 2019 a la fecha) del Sistema Nacional de Investigadores (ANII, Uruguay). Anterior Candidato (2009), Nivel 1 activo (2010-2011), Nivel 1 asociado (2011-2019).
3. Miembro activo del Ascona B-DNA Consortium (ABC, <https://bisi.ibcp.fr/ABC/Welcome.html>). Primer miembro latinoamericano en unirse a este consorcio internacional. 2013 a la fecha.
4. Profesor visitante del Departamento de Química, de la Universidad Federal de Sao Carlos (UFSCar). Brasil. Mayo 2013.
5. Miembro ordinario de la Sociedad de Biofísica de España, 2016 a la fecha. Invitado a dar una presentación oral en el congreso de la SBE de Sevilla 6-8 de junio 2017 (<http://sevilla2017.sbecongress.org/index.aspx>).
6. Profesor visitante de la Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Buenos Aires. Argentina. Agosto 2016-2018.
7. Miembro de la Sociedad Uruguaya de Biociencias (SUB), seccionales SBBM y +Biofísica. 2019.
8. Investigador honorario del Instituto de Investigación Biomédica (IRB Barcelona), 2019 a la fecha.
9. Miembro del Club del ARN del Uruguay, 2019 a la fecha.
10. Investigador honorario del Institut Pasteur de Montevideo. Lab. de Genética Funcional, marzo 2020 a la fecha.
11. Miembro del South American Initiative for Molecular Simulations (SAIMS), 2020 a la fecha.

GESTION, ADMINISTRACION y CO-GOBIERNO:

1. Miembro de la Comisión de Informática de la Facultad de Ciencias, Udelar. Período 2003-2006.
2. Miembro de la Comisión de Informática y Biblioteca por el Instituto de Química Biológica, Facultad de Ciencias, Udelar. Período 2002-2005.
3. Asistente académico del Decano Ricardo Ehrlich, Facultad de Ciencias, Udelar. Encargado de los temas de presupuesto, servicio de informática y biblioteca. Período 2003-2005.
4. Miembro suplente de la delegación docente al Consejo de la Facultad de Ciencias, período 2006-2009.
5. Miembro suplente de la delegación docente a la Comisión Coordinadora Docente de la Licenciatura en Bioquímica, período 2007-2009.
6. Representante del Ministerio de Educación y Cultura en la Jornadas del proyecto europeo NMP-DeLA? Implementación de las Nanociencias, nanotecnologías, materiales y nuevas tecnologías de producción, en los países de América Latina?. 7 y 8 de octubre 2013.
7. Entrevista en Radio Uruguay 1050 sobre ADN y las simulaciones moleculares, en el programa Efecto Mariposa. 18 de Agosto de 2015. Enlace a la entrevista:
<http://www.mec.gub.uy/innovaportal/v/74014/50/mecweb/gattaca?parentid=11305>
8. Entrevista en Radio Uruguay 1050 en el programa Sobre Ciencia (Gustavo Villa). 15 de agosto 2016. Enlace a la entrevista:
i) Investigan el código genético para perfeccionar lo que insumió 500 millones de años de evolución. (<http://www.mec.gub.uy/innovaportal/v/91279/22/mecweb/investigan-el-codigo-genetico-para-perfeccionar-lo-que-insumio-500-millones-de-anos-de-evolucion?parentid=11305>)
ii) Epigenética: el impacto del cambio climático en el futuro de la evolución de la vida (<http://www.mec.gub.uy/innovaportal/v/91274/22/mecweb/epigenetica:-el-impacto-del-cambio-climatico->

en-el-futuro-de-la-evolucion-de-la-vida?parentid=11305).

9. Entrevista para el blog de divulgación científica Allelos (Barcelona), 20 de octubre 2016. La importancia del ADN no codificante: estructura de la cromatina, los cromosomas y el núcleo. Enlace a la entrevista: <https://alelos.com/en/2016/10/442/>. Editada por Pablo D. Dans, escrita por Michela Candotti.
10. Columna de Ciencia y Tecnología para UYpress (considerada de interés Academia Nacional de Ciencias del Uruguay), 22 de marzo 2017. La madre de todos los descubrimientos: La entrada en escena de la doble hélice de ADN en la primavera del 53. Autor: Pablo D. Dans. Editada por el Prof. Héctor Musto. Enlace a la columna: <http://www.uypress.net/auc.aspx?75966,162>.
11. Entrevista en el periódico La Diaria realizada por Leo Lagos y publicada el 14 de febrero de 2019 en la sección de Investigaciones Científicas: ¿Matrix, ADN y biofísica computacional?. Enlace a la nota: <https://ciencia.ladiaria.com.uy/articulo/2019/2/matrix-adn-y-biofisica-computacional/>. Editada por Pablo D. Dans.
12. Entrevista en Radio Uruguay 1050 en el programa Sobre Ciencia (Gustavo Villa), el 23 de abril de 2019. ¿Edición de ADN, una puerta que la Ciencia ya abrió?. Enlace a la nota: <http://sobreciencia.uy/edicion-del-adn-una-puerta-que-la-ciencia-ya-abrio/>
13. Charla de divulgación realizada en el marco del programa Hacer ConCiencia promovido y financiado por ANTEL-PEDECIBA (área Química). Se llevó a cabo el 24 de abril 2019 en el Auditorio Mario Benedetti: ¿1953, la entrada en escena de la doble hélice de Watson y Crick?. Enlace al resumen de la charla: https://www.antel.com.uy/web/innova/innovacion/-/asset_publisher/zn28gH7fD27k/content/hacer-conciencia-con-el-adn/maximized; y enlace a la charla a través de VeraTV: <http://veramas.com.uy/veramas/vod/50627/795>.
14. Entrevista en En Perspectiva (Radio Mundo), en el programa ¿La mesa de los científicos? conducido por Romina Andrioli y Hector Musto, el 10 de setiembre 2020. ¿Los profesionales repatriados? junto a la Dra. Luisa Berná y el Dr. Martin Reiris. <https://www.enperspectiva.net/especiales/coronavirus/la-mesa-cientificos-los-profesionales-repatriados/>
15. Gira de divulgación científica sobre temas de Epigenética y Nutrición junto a la Nutricionista Maria Gabriela Acosta (Paraguay). Se brindó una serie de charlas de divulgación en la Universidad de Buenos Aires (abril 2022), el Instituto Clemente Estable y la UdelaR (mayo 2022) y en la Universidad Autónoma de Asunción (agosto 2022). "Luz, Cámara, Epigenética y Nutrición".

Información adicional

PROYECTOS PROPIOS APROBADOS

1. Proyecto CSIC de iniciación en la investigación ¿Modelado de la estructura y mecanismo de acción molecular de compuestos de potencial acción antineoplásica de Pd(II) y Pt(II) con Piridinas?, aprobado científicamente en la categoría muy bueno pero no financiado, año 2002.
2. Proyecto CSIC de jóvenes investigadores ¿Modelado de la estructura y mecanismo de acción molecular de compuestos de potencial acción antineoplásica de Pd(II) y Pt(II)?, aprobado científicamente en la categoría muy bueno y financiado, año 2003-2004.
3. Proyecto CSE para la realización de eventos relacionados con la Enseñanza media. Aprobado y financiado, responsables: Pablo D. Dans, Julia Leymoní (Unidad de Enseñanza, Facultad de Ciencias). Jornada sobre Educación a Distancia, diciembre 2004.
4. PRACE (Partnership for advanced computing in Europe) 8th call, 2013. Proyecto co-presentado con la Dra. Michela Candotti y Modesto Orozco: ¿Molecular crowding effect on protein landscape?. Aprobado y financiado con 33 millones de horas/core de cálculo intensivo en el centro de cálculo MareNostrum (España).
5. PRACE (Partnership for advanced computing in Europe) 9th call, 2014. Proyecto: ¿Protein-DNA binding allostery?. Aprobado y financiado con 29 millones de horas/core de cálculo intensivo en el centro de cálculo MareNostrum (España). Proyecto co-presentado con Modesto Orozco.
6. PRACE (Partnership for advanced computing in Europe) 12th call, 2015. Proyecto: ¿DNA crystal simulations: a step towards the understanding of the crowded cellular environment?. Aprobado y financiado con 22 millones de horas/core de cálculo intensivo en el centro de cálculo MareNostrum (España). Proyecto co-presentado con Antonija Kuzmanic y Modesto Orozco.
7. PRACE (Partnership for advanced computing in Europe) 13th call, 2016. Proyecto co-presentado con la Dra. Antonija Kuzmanic y Modesto Orozco: ¿Effects of point mutation on the activation of p38? MAPK?. Aprobado y financiado con 31 millones de horas/core de cálculo intensivo en el centro de cálculo Marconi-KNL (Italia).
8. First edition of Ignite Grant ¿Barcelona Institute of Science and Technology, 2017. Proyecto presentado con la Dra. Marie Victoire Neguembor (CRG): ¿GENSTORM: an integrated approach to visualize and model the spatial conformation of genes at the nanoscale level?. Aprobado y financiado con 20,000 euros por 8 meses (España).
9. PRACE (Partnership for advanced computing in Europe) 15th call, 2017. Proyecto co-presentado con el Dr. Hansel Gomez y Modesto Orozco: ¿Understanding of the molecular basis of the decoding process in prokaryotic and eukaryotic ribosomal A-sites?. Aprobado y financiado con 32 millones de horas/core de cálculo intensivo en el centro de cálculo Piz-Daint (Suiza).
10. Second edition of Ignite Grant ¿Barcelona Institute of Science and Technology, 2018. Proyecto

presentado con la Dra. Marie Victoire Neguembor (CRG): ¿GENSTORM2: striking back to determine how genes fold and work in space and time?. Aprobado y financiado con 50,000 euros por 12 meses (España).

11. Proyecto CSIC I+D Modalidad 1: ¿Dilucidando el sistema ligninolítico: del transcriptoma a la actividad enzimática?. 2018-2020. Facultad de Química (UdelaR). Miembro del equipo, co-responsable de la redacción del proyecto (responsable Dra. Gianna Cecchetto). Aprobado y financiado con 1,249,975 \$U por 24 meses (Uruguay).

12. Proyecto FCE Modalidad 2: ¿Un estudio sobre la genética, actividad y estructura de cannabinoides sintasas en Cannabis?. 2018-2020. Instituto de Investigaciones Clemente Estable (IIBCE). Miembro del equipo, co-responsable de la redacción del proyecto (responsable Dra. Astrid Agorio). Aprobado y financiado con 1,000,000 \$U por 24 meses (Uruguay).

13. Proyecto FCE Modalidad 2: ¿Caracterización estructural y dinámica de tRNA-halves?. 2019-2021. CENUR Litoral Norte e Instituto Pasteur de Montevideo. Responsable del proyecto (el proyecto fue escrito y otorgado al Dr. Leonardo Darré, pero dada su desvinculación de la academia se acordó con la ANII y el IP su transferencia a mi cargo). Encargado de la re-adequación del proyecto dado el cambio de responsable. Traspasado con 860,860 \$U (~20,000 U\$) por 24 meses (Uruguay).

14. Proyecto a Centros Interdisciplinario (UdelaR): Centro de Estudios Interdisciplinarios de Biodiversidad Orientado a aplicaciones en Salud (CEIBOS). 2021-2025. Responsables: Dra. Sonia Rodríguez Giordano, DEPBIO, Facultad de Química, UdelaR (Coordinadora), Dr. Pablo Dans, CENUR Litoral Norte (Salto), UdelaR, Dr. Carlos Testuri, INCO, Facultad de Ingeniería, UdelaR. Aprobado y financiado con 13,000,000 \$U (~325,000 U\$) por 5 años (Uruguay).

15. Proyecto CSIC I+D: ¿ProAgricultura: estudio de los beneficios de la acumulación de prolina en plantas mediante una aproximación multidisciplinaria?. 2021-2022. Miembro del equipo de investigación, co-responsable de la redacción del proyecto (responsable Dr. Santiago Signorelli, Facultad de Agronomía, UdelaR). Aprobado y financiado con 1,000,000 \$U (~23,000 U\$). por 2 años (Uruguay).

16. Proyecto de investigación fundamental FCE Modalidad 1: ¿Péptidos antimicrobianos vegetales. Microorganismos blanco y modos de acción?. 2020-2022. Facultad de Química (UdelaR). Miembro del equipo de investigación, co-responsable de la redacción del proyecto (responsable Dra. Gianna Cecchetto). Aprobado y financiado con 1,300,000 \$U (~32,500 U\$) por 36 meses (Uruguay).

17. Proyecto EU-LAC: ABSarbo. Aptamer-based strategies to create novel biotechnological tools against Arboviruses. Co-responsable junto a la Dra. Calzada. 2023-2024. El proyecto involucra 6 países (Uruguay, Perú, México, España, Austria y Alemania). Aprobado y financiado con 20,000 USD (solo contraparte uruguaya del proyecto) por 24 meses. Se usarán instalaciones de la UdelaR de última generación como el laboratorio de bioseguridad P3.

18. Proyecto CSIC I+D: ¿Método de predicción estructural y dinámica de motivos inusuales de ADN: Estudio del espacio conformacional de aptámeros?. Responsable, 2023-2024. Aprobado y financiado con 1,250,000 \$U por 24 meses (Uruguay).

PARTICIPACION EN PROYECTOS DE INVESTIGACION / I+D

1. Participación en el proyecto: ¿Estudio del mecanismo de acción del Cisplatino y proposición de nuevos análogos como agentes quimioterapéuticos?, Comisión Sectorial de Investigaciones Científicas (CSIC) Uruguay 2000-2002. Proyecto a cargo de la Dra. Coitiño, Lab. de Química Teórica y Computacional, Fac. Ciencias.

2. Participación en el proyecto de la Comisión Sectorial de Enseñanza (CSE): ¿Implementación de un sistema semi-presencial para los dos primeros años de la Licenciatura en Bioquímica?, a cargo de la Dra. Coitiño, año 2001.

3. Participación en el proyecto: ¿Influencia del entorno fisicoquímico sobre la estructura electrónica y reactividad de bases de ADN: hacia el diseño racional de sondas para diagnóstico y fármacos para quimioterapia altamente selectivos de Ru(II)?, CSIC Uruguay 2004-2006. Proyecto a cargo de la Dra. Coitiño, Lab. de Química Teórica y Computacional, Fac. Ciencias.

4. Participación en el proyecto: ¿Desarrollo de Iniciativas Biotecnológicas: Vinculación y Valorización de la Investigación?. Programa de la Naciones Unidas para el Desarrollo (PNUD). Uruguay. 2004 - 2006. Dr. Ricardo Ehrlich (Ministro de Educación y Cultura).

5. Participación en el proyecto Fondo Clemente Estable: ¿Caracterización estructural de procesos de transcripción viral del VIH-1?. Agencia Nacional de Investigación e Innovación. Uruguay. 2008 - 2010. Dr. Sergio Pantano.

6. Participación en el proyecto Combination of Collaborative Project and Coordination and Support Action ScalaLife. European Commission. 2010 - 2013. Dr. Modesto Orozco.

7. Participación en el proyecto: ¿Estudio de formas inusuales o tensionadas de los ácidos nucleicos de potencial interés biomédico?. MINECO (código BIO2012-32868). 2012-2015. Dr Modesto Orozco.

8. Participación en el proyecto Grupo de recerca consolidat: ¿Modelització Molecular i

Bioinformática de ácidos nucleicos?. AGAUR (2014 SGR 134). 2014-2016. Dr. Modesto Orozco.

9. Participación en el proyecto ERC Advanced Grant: ?Multiscale simulation of DNA (SimDNA)?. European Research Council (ERC 291433). 2012-2017. Dr. Modesto Orozco.

10. Participación en el proyecto European three-dimensional (3D) genomics project: ?Multi-scale complex genomics (MuG)?. EU?s Horizon2020 Programme. 2016-2018. Director Dr. Modesto Orozco.

11. Spanish Ministry of Science. BFU2015-64802-R. Simulación de formas tensionadas o inusuales del DNA de interés biomédico?. 2016-2018. Dr. Modesto Orozco.

12. EU-Center of Excellence in High Performance Computing. BIOEXCEL: ?A center of Excellence in Biosimulation?. H2020 European Commission. 2015-2019. Dr. Modesto Orozco.

Indicadores de producción

ACTIVIDADES	33
Líneas de investigación	6
Proyectos Investigación Desarrollo	8
Docencia	10
Gestión Académica	3
Pasantía	6
PRODUCCIÓN BIBLIOGRÁFICA	144
Artículos publicados en revistas científicas	52
Completo	51
Resumen	1
Artículos aceptados para publicación en revistas científicas	1
Completo	1
Trabajos en eventos	86
Libros y Capítulos	2
Capítulos de libro publicado	2
Textos en periódicos	3
Revistas	2
Periodicos	1
PRODUCCIÓN TÉCNICA	28
Productos tecnológicos	2
Trabajos técnicos	1
Otros tipos	25
EVALUACIONES	46
Evaluación de proyectos	6
Evaluación de eventos	3
Evaluación de publicaciones	21
Evaluación de convocatorias concursables	8
Jurado de tesis	8

FORMACIÓN RRHH	30
Tutorías/Orientaciones/Supervisiones concluidas	24
Tesis/Monografía de grado	4
Tesis de doctorado	5
Tesis de maestría	4
Otras tutorías/orientaciones	7
Iniciación a la investigación	3
Orientación de posdoctorado	1
Tutorías/Orientaciones/Supervisiones en marcha	4
Tesis de doctorado	1
Orientación de posdoctorado	1
Tesis de maestría	1
Tesis/Monografía de grado	1
Tutorías/Orientaciones/Supervisiones desistidas	2
Tesis de maestría	1
Tesis de doctorado	1