



PABLO DANIEL DANS
PUIGGRÒS

Doctor

pablo.dans@irbbarcelona.org

<http://mmb.irbbarcelona.org/www/user/48>

Carrer Baldiri Reixac, 10, 08028, Barcelona, España
+34 934039073

SNI

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

Fecha de publicación: 19/09/2018
Última actualización SNI: 19/09/2018

Datos Generales

INSTITUCIÓN PRINCIPAL

Insitute For Research In Biomedicine / España

DIRECCIÓN INSTITUCIONAL

Institución: Instituto de Investigación Biomédica Barcelona / Sector Extranjero/Internacional/Otros

Dirección: Molecular Modelling & Bioinformatics group / 08028 / Barcelona , España

Teléfono: (34) 934039073

Correo electrónico/Sitio Web: pablo.dans@irbbarcelona.org

<http://mmb.irbbarcelona.org/www/user/48>

Formación

Formación académica

CONCLUIDA

DOCTORADO

Doctorado en Química (2002 - 2008)

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

Título de la disertación/tesis: 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

Institución financiadora: Universidad de la República / Facultad de Química - UDeLaR , 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 - UDeLaR , Uruguay

Título de la disertación/tesis: 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

Institución financiadora: Universidad de la República / Facultad de Química - UDeLaR , 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 - UDeLaR, Uruguay

Título de la disertación/tesis: 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: [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

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 /

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

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

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Inorgánica y Nuclear / Bioinorgánica

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

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

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Computación / Calculo numérico y computación

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

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

Areas de conocimiento:

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

Química Bioinorgánica (01/2003 - 01/2003)

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

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Inorgánica y Nuclear / Bioinorgánica

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

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

Áreas 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 - UDeLaR, Uruguay

Áreas 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

Áreas 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

Áreas 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

Áreas 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

Áreas 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

Áreas de conocimiento:

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

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

Reconocimiento de las prácticas docentes en ciencias (2002)

Tipo: Seminario

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

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

EN MARCHA

POSDOCTORADOS

Desarrollo de modelos para ácidos nucleicos y bioinformática (2011)

Sector Extranjero/Internacional/Otros / Instituto de Investigación Biomédica Barcelona, España
Palabras Clave: Simulaciones atomísticas Simulaciones coarse-grain Bases de datos experimentales

Áreas de conocimiento:

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

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 bien / Lee muy bien / Escribe bien

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 EXTRANJERO/INTERNACIONAL/OTROS - ESPAÑA

Barcelona Supercomputing Center

VÍNCULOS CON LA INSTITUCIÓN

Funcionario/Empleado (02/2011 - a la fecha)

Investigador posdoctoral ,40 horas semanales / Dedicación total

SECTOR EXTRANJERO/INTERNACIONAL/OTROS - ESPAÑA

Instituto de Investigación Biomédica Barcelona

VÍNCULOS CON LA INSTITUCIÓN

Funcionario/Empleado (02/2011 - a la fecha)

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 atomísticas 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
Areas 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

Areas de conocimiento:

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

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

Institut Pasteur de Montevideo

VÍNCULOS CON LA INSTITUCIÓN

Funcionario/Empleado (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 teóricos. (07/2009 - 07/2011)

20 horas semanales
Institut Pasteur de Montevideo , Grupo de Simulaciones Biomoleculares
Investigación
Integrante del Equipo
Cancelado
Alumnos encargados 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
Areas 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 - UDeLaR

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.
Escalafón: 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.
Escalafón: 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.
Escalafón: 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:
Areas 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 - UDeLaR, 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 - UDeLaR, 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 - UDeLaR, 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 - UDeLaR, 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 â 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 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: Sin horas
Carga horaria de investigación: 34 horas
Carga horaria de formación RRHH: 4 horas
Carga horaria de extensión: Sin horas
Carga horaria de gestión: 2 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. Tengo solvencia en el manejo de herramientas cuánticas (QM), clásicas (MM), híbridas (QM/MM), dinámica molecular, simulaciones de Monte Carlo y docking. También he adquirido manejo en técnicas de semejanza estructural y técnicas estadísticas para el ordenamiento, clasificación y correlación de descriptores fisicoquímicos (JCIM 2009) y actividades biológicas (QSAR/QSRP), así como estadística bayesiana (NAR 2012). Tengo conocimientos de programación, scripting, desarrollo de aplicaciones web, e implementación de bases de datos en biología estructural (NAR 2016a). Desde el 2008 trabajo intensamente en el desarrollo de modelos y hamiltonianos multi-escala de ácidos nucleicos y solvente (JCTC 2010a, 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, co-dirijo actualmente dos doctorados centrados en el desarrollo de modelos mesoscópicos de cromatina y cromosomas (iniciados en 2014 y 2015). 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), me ha permitido ganar experiencia en data mining de bases de datos estructurales en 3D, refinamiento de estructuras de RMN (NAR 2016c), y simulaciones en entornos cristalinos. En 2014 he iniciado una tercera línea de investigación propia sobre el espacio conformacional de los ARN y su dinámica (JACS 2016). Mi especialidad es la estructura, dinámica,

flexibilidad, muestreo conformacional, propiedades físicas dependientes de la secuencia y evolución (Science advances 2016) de ácidos nucleicos (ADN y ARN), incluyendo el efecto de las modificaciones epigenéticas, apareamientos no canónicos (NAR 2015), e interacción con proteínas. 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 15 años trabajando sobre la propiedades secuencia dependientes del ADN. A su vez, integro la Sociedad de Biofísica de España, quién ha premiado dos de mis publicaciones como "artículo del mes en Biofísica en España" durante el 2016.

Producción bibliográfica

ARTÍCULOS PUBLICADOS

ARBITRADOS

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

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 03051048

DOI: [10.1093/nar/gkw1355](https://doi.org/10.1093/nar/gkw1355)

<https://academic.oup.com/nar/article/45/7/4217/2907604>

Scopus' WEB OF SCIENCE"

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

DOI: [10.1126/sciadv.1501860](https://doi.org/10.1126/sciadv.1501860)

<http://advances.sciencemag.org/content/2/4/e1501860.abstract>

Scopus' WEB OF SCIENCE"

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

DOI: [10.1093/nar/gkw264](https://doi.org/10.1093/nar/gkw264)

<https://nar.oxfordjournals.org/content/early/2016/04/15/nar.gkw264.full>

Scopus' WEB OF SCIENCE"

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

DOI: [10.1021/jacs.6b09471](https://doi.org/10.1021/jacs.6b09471)

Scopus' WEB OF SCIENCE"

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

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

ISSN: 19487185

DOI: [10.1021/acs.jpcllett.6b02451](https://doi.org/10.1021/acs.jpcllett.6b02451)

Scopus* WEB OF SCIENCE*

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

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>

Scopus* WEB OF SCIENCE*

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

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

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

Scopus* WEB OF SCIENCE*

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

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

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

Scopus* WEB OF SCIENCE*

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
DOI: [10.1038/nmeth.3658](https://doi.org/10.1038/nmeth.3658)
<http://www.nature.com/nmeth/journal/v13/n1/abs/nmeth.3658.html>
Scopus' WEB OF SCIENCE"

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
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.
Scopus' WEB OF SCIENCE"

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

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
DOI: [10.1073/pnas.1405702111](https://doi.org/10.1073/pnas.1405702111)
<http://www.pnas.org/content/111/35/E3624.short>
The strength of DNADNA and DNAligand 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.
Scopus' WEB OF SCIENCE"

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

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.

Scopus® WEB OF SCIENCE™

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

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

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>

Scopus® WEB OF SCIENCE™

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

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

Physical Review E, Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics, 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

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

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

Scopus® WEB OF SCIENCE™

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

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)

Scopus® WEB OF SCIENCE™

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

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

<http://pubs.rsc.org/en/Content/ArticleLanding/2011/CP/c1cp21248f>

Scopus® WEB OF SCIENCE™

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

DOI: [10.1021/ct100379f](https://doi.org/10.1021/ct100379f)

[http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/ct100379f?](http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/ct100379f?prevSearch=%2528Darr%252C%25A9%252CL.%2529%2BNOT%2B%25)

[prevSearch=%2528Darr%252C%25A9%252CL.%2529%2BNOT%2B%25](http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/ct100379f?prevSearch=%2528Darr%252C%25A9%252CL.%2529%2BNOT%2B%25)

Scopus® WEB OF SCIENCE™

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

DOI: [10.1021/ct900653p](https://doi.org/10.1021/ct900653p)

[http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/ct900653p?](http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/ct900653p?prevSearch=%255Bauthor%253A%2BDans%252C%2BP.%2BD.%255D)

[prevSearch=%255Bauthor%253A%2BDans%252C%2BP.%2BD.%255D](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.

Scopus® WEB OF SCIENCE™

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

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

<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.

Scopus[®] WEB OF SCIENCE[™]

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

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

Scopus[®] WEB OF SCIENCE[™]

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

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

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

Scopus[®] WEB OF SCIENCE[™]

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

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

<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 to 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.

Scopus® WEB OF SCIENCE™

NO ARBITRADOS

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

PABLO D. DANS

FEBS Journal (The), 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

LIBROS

Computational Tools for Chemical Biology (Participación , 2017)

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

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

En prensa

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

Organizadores: Sonsoles Martín-Santamaría

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

Edición: ,

Editorial: Comisión Sectorial de Enseñanza, Montevideo

Tipo de publicación: Investigación

Palabras clave: Enseñanza de la Físicoquímica moderna Facultad de Ciencias - UDELAR

Áreas 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

Organizadores: Comisión Sectorial de Enseñanza - Universidad de la República

Página inicial 164, Página final 172

PUBLICACIÓN DE TRABAJOS PRESENTADOS EN EVENTOS

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

Resumen

F. BATTISTINI, PABLO D. DANS, M. OROZCO

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)

Resumen

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

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)

Resumen

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

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

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica /

Medio de divulgación: Papel

<http://mmb.irbbarcelona.org/BioNMR2012/regis.htm>

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

Resumen
PABLO D. DANS , M. OROZCO

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)

Resumen
PABLO D. DANS , M. OROZCO

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)

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

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)

Resumen
L. DARRE , PABLO D. DANS , PANTANO, S

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)

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

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>

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

Resumen
MACHADO, M. , PABLO D. DANS , L. DARRE , PANTANO, S

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)

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

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)

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

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)

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

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)

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

Evento: Internacional
Descripción: 2do Congreso Argentino de Bioinformática
Ciudad: Quilmes, Argentina
Año del evento: 2010
Palabras clave: Simulaciones Modelos simplificados desempeño costo/presión
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)

Resumen
L. DARRE , MACHADO, M. , PABLO D. DANS , F. E. HERRERA , PANTANO, S

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)

Resumen
PABLO D. DANS , PANTANO, S

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/>

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

Resumen
PABLO D. DANS , ZEIDA, A. , PANTANO, S

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)

Resumen
ZEIDA, A. , PABLO D. DANS , PANTANO, S

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)

Resumen
MERLINO, A. , MARÍN, R. M. , PABLO D. DANS , DAZA, E. E. , E. LAURA COITIÑO

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)

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

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

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

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

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 monoquo-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)

Resumen

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

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)

Resumen

PABLO D. DANS , E. LAURA COITIÑO

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)

Resumen

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

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 Mytomyacin 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)

Resumen

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

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

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

Resumen

PABLO D. DANS , E. LAURA COITIÑO

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)

Resumen

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

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-PCM^{2a,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)

Resumen

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

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)

Resumen

PABLO D. DANS , E. LAURA COITIÑO

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)

Resumen

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

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

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)

Resumen

PABLO D. DANS , E. LAURA COITIÑO

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

Areas 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).

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

Resumen

PABLO D. DANS, E. LAURA COITIÑO

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 reacionalmente 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)

Resumen

PABLO D. DANS , E. LAURA COITIÑO

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)

Resumen

PABLO D. DANS , E. LAURA COITIÑO

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)

Resumen

PABLO D. DANS , E. LAURA COITIÑO

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

Areas 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 bupiridinas 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 cuánticos, 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 SN₂ de la hidrólisis de los compuestos [cis-bupiridinadicloroPt(II)] y [cis-bupiridinacloro(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)

Resumen

PABLO D. DANS, E. LAURA COITIÑO

Evento: Internacional

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

Ciudad: Montevideo

Año del evento: 2002

Palabras clave: Modelado cuantico Datamining sobre propiedades moleculares

Areas 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-diaminodicloroPt(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)

Resumen

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

Evento: Internacional

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

Ciudad: Montevideo

Año del evento: 2002

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

Áreas de conocimiento:

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

Electroquímica / Química Computacional

Medio de divulgación: Papel

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

Resumen

PABLO D. DANS, E. LAURA COITIÑO

Evento: Internacional

Descripción: Xth International Congress of Quantum Chemistry (ICQC)

Ciudad: Menton

Año del evento: 2000

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

Áreas 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)

Resumen

PABLO D. DANS, E. LAURA COITIÑO

Evento: Internacional

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

Ciudad: Caxambu

Año del evento: 2000

Palabras clave: Modelado cuántico Interacción Cisplatino-ADN

Áreas 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)

Resumen

PABLO D. DANS, E. LAURA COITIÑO

Evento: Internacional

Descripción: 39 Sanibel Symposium

Ciudad: St. Augustine

Año del evento: 1999

Palabras clave: Cisplatino-DNA interaction Molecular Modeling

Áreas 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)

Resumen
PABLO D. DANS , E. LAURA COITIÑO

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

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
Areas 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, Otra
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
Areas 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
Areas 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 beveraje base vendidos 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 cual se realizaron ciertas suposiciones básicas necesarias para llevar adelante el análisis estadístico.

Evaluaciones

EVALUACIÓN DE PROYECTOS

EVALUACIÓN INDEPENDIENTE DE PROYECTOS

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

Argentina

Agencia Nacional de Promoción Científica y Tecnológica - ANPCyT

Cantidad: Menos de 5

ANII - PEDECIBA área Biología subárea Biofísica (2010 / 2010)

Uruguay

ANII - PEDECIBA área Biología subárea Biofísica

Cantidad: Menos de 5

Evaluador externo del proyecto de tesis de Maestría del Lic. Leonardo Darre: "Desarrollo de un modelo simplificado de solvente acuoso para uso en simulaciones de dinámica molecular". Tutor: Dr. Sergio Pantano, Co-Tutor: Dr. Fernando Herrera.

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

EVALUACIÓN DE EVENTOS Y CONGRESOS

Computational Modelling and Simulations of Biological Systems (2010)

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

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).

Formación de RRHH

TUTORÍAS CONCLUIDAS

POSGRADO

The RNA conformational landscape: Studying the backbone through eta-theta glasses (2016)

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
Medio de divulgación: Papel
País/Idioma: España, Inglés
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 (2015)

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
Medio de divulgación: Papel
País/Idioma: Inglaterra, Inglés
Palabras Clave: interacción ADN-cationes parametros de campos de fuerzaciones divalentes y monovalentes
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica computacional

Modelado Molecular de Procesos Relacionados a la Transcripción del Virus VIH-1 (2012)

Tesis de doctorado
Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Ciencias - UDeLaR , Uruguay
Programa: Doctorado en Ciencias Biológicas (UDELAR-PEDECIBA)
Nombre del orientado: Matias Rodrigo Machado
Medio de divulgación: Papel
País/Idioma: Uruguay, Español
Areas 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) (2009)

Tesis de maestría
Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Ciencias - UDeLaR , Uruguay
Programa: Maestría en Biofísica
Nombre del orientado: Matias Rodrigo Machado
Medio de divulgación: Papel
País/Idioma: Uruguay, Español
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica teórica

GRADO

Mismatch detection mechanism of the MutS (2016)

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/Idioma: España, Español
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 (2015)

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
Medio de divulgación: Papel
País/Idioma: España, Español
Palabras Clave: Simulaciones de Dinamica Molecular Energia libre de union Interacción ARN-cationes
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica computacional

Desarrollo de un modelo simplificado para la simulación de ADN (2011)

Tesis/Monografía de grado
Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Ciencias - UDeLaR , Uruguay
Programa: Licenciatura en Bioquímica
Nombre del orientado: Ari Zeida
Medio de divulgación: Papel
País/Idioma: Uruguay, Español
Palabras Clave: Molecular dynamics Coarse-grained force field Physical properties of DNA
Áreas 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 (2009)

Tesis/Monografía de grado
Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Ciencias - UDeLaR , Uruguay
Programa: Licenciatura en Bioquímica
Nombre del orientado: Tamara Meirelles
Medio de divulgación: Papel
País/Idioma: Uruguay, Español
Palabras Clave: modelado cuántico y QM/MM Simulaciones moleculares Glicación de peptidos Desarrollo de Parámetros
Áreas 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

Structural and dynamical studies of the ribosomal A-Site (2015)

Otras tutorías/orientaciones
Sector Educación Superior/Público / , Alemania
Tipo de orientación: Tutor único o principal
Nombre del orientado: Fabian Keller
Medio de divulgación: Papel
País/Idioma: Alemania, Inglés
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

Tutorías del reglamento 2000 de la Licenciatura en Bioquímica (2011)

Otras tutorías/orientaciones
Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Ciencias - UDeLaR , Uruguay
Nombre del orientado: Mariana Pegazzano
Medio de divulgación: Otros

País/Idioma: Uruguay, Español
Palabras Clave: Biología molecular Inmunología
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular

TUTORÍAS EN MARCHA

POSGRADO

Development of coarse-grained DNA and chromatin models (2014)

Tesis de doctorado
Sector Extranjero/Internacional/Otros / Universidad de Barcelona , España
Programa: Física
Tipo de orientación: Cotutor en pie de igualdad
Nombre del orientado: Jurgen Walther
Medio de divulgación: Papel
País/Idioma: España, Inglés
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

Chromosomes and Chromatin modeling (2014)

Tesis de doctorado
Sector Extranjero/Internacional/Otros / Universidad de Barcelona , España
Programa: Biomedicina
Tipo de orientación: Cotutor en pie de igualdad
Nombre del orientado: Diana Buitrago
Medio de divulgación: Papel
País/Idioma: España, Inglés
Palabras Clave: Estructura de cromosomas Territorios Cromatina activa/inactiva Simulaciones coarse grain
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica computacional

Computational studies of perturbation response and information transfer in nucleic acids (2013)

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

Otros datos relevantes

PREMIOS, HONORES Y TÍTULOS

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)

UNESCO y International Centre for Theoretical Physics.

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-depended 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

Conferencia como investigador invitado (2016)

Otra

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 / Biofisica computacional, bioquímica y biología molecular

Conferencia plenaria (2016)

Seminario

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

Argentina

Tipo de participación: Conferencista invitado

Carga horaria: 8

Nombre de la institución promotora: 1er Workshop Latinoamericano de Modelado Molecular y Simulación Computacional

Palabras Clave: Simulaciones constante dielectrica poisson-boltzmann propiedades fisicas del ADN

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica

Conferencia como investigador invitado (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

VII Reunión de la Red Temática Española de RNA (2016)

Congreso

t-RNAsaurus rex and the frozen genetic code

España

Tipo de participación: Poster

Carga horaria: 8

Nombre de la institución promotora: Red Temática Española de RNA (RiboRed)

Palabras Clave: Simulaciones Estructura de tRNA anticodon loop evolucion codigo genetico

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica computacional, bioquímica y biología molecular

RNA Structure, Dynamics and Function (2016)

Congreso

Looking at RNA through η/θ glasses

Italia

Tipo de participación: Poster

Carga horaria: 30

Nombre de la institución promotora: SISSA

Palabras Clave: datamining de bases de datos espacio conformacional interacción RNA-proteinas

Ramachandran para acidos nucleicos

Areas de conocimiento:

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

Conferencia como investigador invitado (2015)

Otra

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

Conferencia como investigador invitado (2015)

Otra

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

Conferencia como investigador invitado (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 R_xy
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica computacional

III Jornadas de Bioinformática y Biología Computacional (2015)

Simposio
t-RNAsaurus rex and the freezing of the genetic code
España
Tipo de participación: Expositor oral
Carga horaria: 8
Nombre de la institución promotora: Sociedad Catalana de Biología
Palabras Clave: Simulaciones Estructura de tRNA anticodon loop
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica computacional, bioquímica y biología molecular

Conferencia como investigador invitado (2015)

Otra
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
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica computacional

X Meeting on Nucleic Acids and Nucleosides (2015)

Congreso
A Talk with Siméon and Ludwig: Direct Measurement of the Dielectric Polarization Properties of DNA
España
Tipo de participación: Expositor oral
Carga horaria: 16
Nombre de la institución promotora: RANN
Palabras Clave: Simulaciones constante dielectrica poisson-boltzmann
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica

1st IRB Barcelona Postdoc Day (2014)

Simposio
A talk with Siméon and Ludwig: Direct measurement of the dielectric properties of DNA
España
Tipo de participación: Expositor oral
Carga horaria: 8
Nombre de la institución promotora: IRB Barcelona
Palabras Clave: Dinámica Molecular constante dielectrica poisson-boltzmann Microscopia de fuerza electrostática
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica

Ascona B-DNA Consortium annual meeting (2014)

Encuentro
Unraveling the sequence-dependent polymorphic behavior of CpG steps in B-DNA
España
Tipo de participación: Expositor oral
Carga horaria: 8
Nombre de la institución promotora: Ascona B-DNA Consortium

Palabras Clave: Dinámica Molecular Propiedades secuencia dependientes Consorcio internacional interacción cationes-ADN datamining de bases de datos

Áreas de conocimiento:

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

Conferencia como investigador invitado (2013)

Otra

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

Áreas de conocimiento:

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

The Clock of Life (2013)

Simposio

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

España

Tipo de participación: Poster

Carga horaria: 16

Nombre de la institución promotora: Institute for Research in Biomedicine

Palabras Clave: DNA mechanical properties MD simulations Mesoscopic model Nucleosome formation prediction Epigenetic

Áreas de conocimiento:

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

Bio-NMR (2012)

Congreso

Exploring polymorphisms in B-DNA helical conformations and study of the CG bps

España

Tipo de participación: Poster

Carga horaria: 16

Nombre de la institución promotora: Bio-NMR, Universitat de Barcelona, IRB Barcelona, Barcelona Supercomputing Center

Palabras Clave: Molecular dynamics X-ray conformational space Bimodality in NMR structures

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica

MD simulations of biomolecules (2012)

Encuentro

Sequence dependent electrostatic collapse at DNA grooves: bending and kinking

España

Tipo de participación: Expositor oral

Carga horaria: 12

Nombre de la institución promotora: Institute for Research in Biomedicine

Palabras Clave: Helical conformations DNA mechanical properties MD simulations

Áreas de conocimiento:

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

Bayesian Methods in Biostatistics and Bioinformatics (2012)

Congreso

Model selection using Bayesian statistics in structural and computational biology

España

Tipo de participación: Poster

Carga horaria: 20

Nombre de la institución promotora: Institute for Research in Biomedicine

Palabras Clave: Helical conformations Bayesian methods structural databases MD simulations

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Matemáticas / Estadística y Probabilidad / Bioestadística y bioinformática

XXVIII Reunió Anual de la Xarxa de Referència de R+D+i en Química Teòrica i Computacional (2012)

Encuentro
Exploring polymorphisms in B-DNA helical conformations
España
Tipo de participación: Expositor oral
Carga horaria: 16
Nombre de la institución promotora: Facultat de Farmacia, Universitat de Barcelona
Palabras Clave: Molecular dynamics X-ray conformational space
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica

Coarse-Grain Mechanics of DNA: Part II From Electrons to Oligomers (2011)

Congreso
Bimodality in B-DNA Helical Parameters: Reality or Force-Field Artifact?
Suiza
Tipo de participación: Poster
Carga horaria: 40
Nombre de la institución promotora: CECAM - Centre Européen de Calcul Atomique et Moléculaire
Palabras Clave: Molecular dynamics X-ray conformational space
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica

Coarse-Grain Mechanics of DNA: Part II From Electrons to Oligomers (2011)

Congreso
Breathing, bubbling, bending (and binding?): DNA flexibility from multimicrosecond simulations
Suiza
Tipo de participación: Poster
Nombre de la institución promotora: CECAM - Centre Européen de Calcul Atomique et Moléculaire
Palabras Clave: Molecular dynamics Coarse-grained force field
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica

IRB Barcelona BioMed Seminar (2011)

Seminario
A Coarse-Grained Model of DNA with Almost Atomic Resolution
España
Tipo de participación: Expositor oral
Nombre de la institución promotora: Institute for Research in Biomedicine Barcelona (IRB)
Palabras Clave: Molecular dynamics Coarse-grained force field Helical conformations
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica

Congrès des chimistes theoriciens (2010)

Congreso
Hybrid All-Atom/Coarse-Grain Models for DNA Simulations in Implicit and Explicit Solvents
Francia
Tipo de participación: Expositor oral
Carga horaria: 40
Nombre de la institución promotora: Université de Pau et des Pays de l'Adour
Palabras Clave: Coarse-grain Molecular dynamics nucleic acids reversible electrostatic collapse
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica computacional

Conference on Molecular Aspects of Cell Biology: A Perspective from Computational Physics (2010)

Congreso
Hybrid All-Atom/Coarse-Grain Models for DNA Simulations in Explicit Solvents
Italia
Tipo de participación: Expositor oral

Carga horaria: 40

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

Palabras Clave: Coarse-grain Molecular dynamics nucleic acids minor groove narrowing reversible electrostatic collapse

Areas de conocimiento:

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

2do Congreso Argentino de Bioinformática (2010)

Congreso

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

Argentina

Tipo de participación: Expositor oral

Carga horaria: 120

Nombre de la institución promotora: Asociación Argentina de Bioinformática y Biología Computacional

Palabras Clave: Coarse-grain Molecular dynamics electrostatics DNA

Areas de conocimiento:

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

Conferencia como investigador invitado (2010)

Otra

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

Conferencia como investigador invitado (2010)

Otra

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

Areas de conocimiento:

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

EELA-2 Grid Computing Workshop (2009)

Encuentro

IPMONT researches feasible with Grid Computing

Uruguay

Tipo de participación: Expositor oral

Palabras Clave: Calculos de alto rendimiento Grid computing Aplicaciones biomédicas

Areas de conocimiento:

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

VII Iberoamerican Congress of Biophysics (2009)

Congreso

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

Brasil

Tipo de participación: Poster

Palabras Clave: Modelos Coarse-Grain Simulaciones biomoleculares RNA

Areas de conocimiento:

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

VII Iberoamerican Congress of Biophysics (2009)

Congreso

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

Brasil

Tipo de participación: Poster

Palabras Clave: Modelos Coarse-Grain ADN Simulaciones biomoleculares

Áreas de conocimiento:

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

1eras Jornadas de Bioinformática Local (2008)

Seminario

Desarrollo de un modelo híbrido All-Atom / Coarse-Grain para ácidos nucleicos

Uruguay

Tipo de participación: Expositor oral

Palabras Clave: Modelos Coarse-Grain Simulaciones biomoleculares

Áreas de conocimiento:

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

Conference on modeling and computation of structure and dynamics of condensed phase systems (2008)

Otra

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

Italia

Tipo de participación: Poster

International Conference on Drug Design and Discovery for Developing Countries (2008)

Otra

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

Italia

Tipo de participación: Expositor oral

International Congress of Biological Physics (2007)

Congreso

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

Uruguay

Tipo de participación: Poster

Eighth Giambiagi Winter School and Workshop Research trends in clusters, biomolecules and materials (2006)

Taller

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

Argentina

Tipo de participación: Poster

5as Jornadas de Bioquímica y Biología Molecular (2006)

Congreso

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

Uruguay

Tipo de participación: Poster

Nombre de la institución promotora: SBBM/SUB

Metales en Sistemas Biológicos (2005)

Encuentro

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

Uruguay

Tipo de participación: Expositor oral

Palabras Clave: Físicoquímica computacional Compuestos de Pt y Pd

Áreas de conocimiento:

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

XXX Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina (QUITEL) (2004)

Congreso
Análisis Estadístico con Descriptores Cuánticos DFT sobre una población de 21 Compuestos Análogos del Cisplatino
Portugal
Tipo de participación: Poster
Palabras Clave: Modelado cuantico Estudio estructural Cisplatino y análogos Data mining
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Físicoquímica computacional

XXX Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina (QUITEL)XXX Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina (QUITEL) (2004)

Congreso
Estudio Teórico Comparativo del Mecanismo de la Reacción de Acuación de 7 análogos Cuadros-Planos de Pt(II) y Pd(II) del Cisplatino
Portugal
Tipo de participación: Expositor oral
Palabras Clave: Modelado cuantico Acuación Cisplatino y análogos
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Físicoquímica computacional

XXVIII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina (QUITEL) (2002)

Congreso
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
Uruguay
Tipo de participación: Expositor oral
Palabras Clave: Modelado cuantico Acuación Cisplatino y análogos
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Físicoquímica computacional

XXVIII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina (QUITEL) (2002)

Congreso
Análisis comparativo DFT de la estructura y reactividad de 11 compuestos análogos del Cisplatino con potencial acción antineoplásica
Uruguay
Tipo de participación: Poster
Palabras Clave: Modelado cuantico Estudio estructural Cisplatino y análogos Data mining
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Físicoquímica computacional

XXVI Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina (CHITEL) (2000)

Congreso
Análisis estructural a nivel HF y DFT de los aductos principales formados por el AND con fármacos de la familia del Cisplatino
Brasil
Tipo de participación: Poster
Palabras Clave: Modelado cuantico Aductos Nucleobases-Cisplatino
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Físicoquímica computacional

VII congreso ibero-americano de biología celular (1998)

Congreso
Modelado de la interacción de complejos de paladio con bases del ADN en el contexto de su uso potencial como drogas antitumorales
Uruguay
Tipo de participación: Expositor oral
Palabras Clave: Modelado cuantico ADN y antitumorales
Areas de conocimiento:

Indicadores de producción

PRODUCCIÓN BIBLIOGRÁFICA	68
Artículos publicados en revistas científicas	25
Completo	24
Resumen	1
Trabajos en eventos	40
Libros y Capítulos	2
Capítulos de libro publicado	2
Textos en periódicos	1
Revistas	1
PRODUCCIÓN TÉCNICA	3
Productos tecnológicos	2
Trabajos técnicos	1
EVALUACIONES	12
Evaluación de proyectos	2
Evaluación de eventos	1
Evaluación de publicaciones	5
Evaluación de convocatorias concursables	4
FORMACIÓN RRHH	13
Tutorías/Orientaciones/Supervisiones concluidas	10
Tesis/Monografía de grado	4
Tesis de doctorado	1
Tesis de maestría	3
Otras tutorías/orientaciones	2
Tutorías/Orientaciones/Supervisiones en marcha	3
Tesis de doctorado	3