



PABLO GERMÁN GARAY

Dr. Biología

garaypablo01@gmail.com
<https://github.com/PabloGGaray>

Acegua 4669
095430309

SNI

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas
 Categorización actual: Inicia ción (Activo)

Fecha de publicación: 01/07/2020
 Última actualización: 10/01/2020

Datos Generales

INSTITUCIÓN PRINCIPAL

Institut Pasteur de Montevideo/ Institut Pasteur de Montevideo / Laboratorios de simulaciones biomoleculares / Uruguay

DIRECCIÓN INSTITUCIONAL

Institución: Institut Pasteur de Montevideo / Institut Pasteur de Montevideo / Sector Organizaciones Privadas sin Fines de Lucro/Sociedades Científico-Tecnológicas / Laboratorio de simulaciones biomoleculares
 Dirección: Mataojo 202 / 11400 / Montevideo , Montevideo , Uruguay
 Teléfono: (+598) 2522 0910
 Correo electrónico/Sitio Web: pgaray@pasteur.edu.uy <http://pasteur.uy/>

Formación

Formación académica

CONCLUIDA**DOCTORADO****Doctorado (2012 - 2017)**

Universidad Nacional de San Luis, Facultad de Química, Bioquímica y Farmacia , Argentina
 Título de la disertación/tesis/defensa: Estudio de las Preferencias Conformacionales de Carbohidratos Usando Desplazamientos Químicos
 Tutor/es: Vila Jorge Alberto
 Obtención del título: 2017
 Financiación:
 CONICET , Argentina
 Palabras Clave: carbohidratos desplazamientos químicos glicobiología bioinformática estadística bayesiana
 Areas de conocimiento:
 Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática estructural
 Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biología Celular, Microbiología / Biología Molecular
 Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Determinación estructural

GRADO**Licenciatura Biología Molecular (2003 - 2009)**

Universidad Nacional de San Luis, Facultad de Química, Bioquímica y Farmacia , Argentina
 Título de la disertación/tesis/defensa: Expresión de enzimas antioxidantes en macrófagos alveolares de ratas castradas
 Tutor/es: Biaggio Verónica S.
 Obtención del título: 2009
 Financiación:
 Ministerio de Educación , Argentina
 Palabras Clave: macrófagos alveolares estrés oxidativo ratas castradas enzimas antioxidantes andrógenos
 Areas de conocimiento:
 Ciencias Médicas y de la Salud / Medicina Básica / Bioquímica y Biología Molecular /

Formación complementaria

CONCLUIDA

CURSOS DE CORTA DURACIÓN

Inglés para la Escritura Científica - Nivel Intermedio (03/2017 - 06/2017)

Sector Extranjero/Internacional/Otros / Universidad Nacional de San Luis / Gabinete de Asesoramiento de Escritura Científica (GAECI) , Argentina

60 horas

Palabras Clave: escritura científica inglés artículos científicos escritura

Areas de conocimiento:

Humanidades / Lengua y Literatura / Lenguajes Específicos / Escritura científica en inglés

Termodinámica estadística en biología (04/2016 - 11/2016)

Sector Extranjero/Internacional/Otros / Universidad Nacional de San Luis , Argentina

120 horas

Palabras Clave: termodinámica estadística termodinámica estadística biología biofísica

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Termodinámica estadística

Análisis bayesiano de datos (02/2016 - 03/2016)

Sector Extranjero/Internacional/Otros / Universidad Nacional de San Luis , Argentina

40 horas

Palabras Clave: estadística bayesiana estadística Bayes análisis datos datos análisis

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Matemáticas / Estadística y Probabilidad / Estadística Bayesiana

Espectrometría de masas (07/2015 - 08/2015)

Sector Extranjero/Internacional/Otros / Universidad Nacional de San Luis , Argentina

60 horas

Palabras Clave: espectrometría masas orgánica biomoléculas

Areas de conocimiento:

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

Espectrometría de masas

Biología Evolutiva (07/2013 - 07/2015)

Sector Extranjero/Internacional/Otros / Universidad Nacional de San Luis / Facultad de Química, Bioquímica y Farmacia , Argentina

40 horas

Palabras Clave: Evolución biología

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biología y Biología de la Evolución / Evolución

Algoritmos en bioinformática (02/2015 - 03/2015)

Sector Extranjero/Internacional/Otros / Universidad Nacional de San Luis / Facultad de Química, Bioquímica y Farmacia , Argentina

40 horas

Palabras Clave: algoritmos bioinformática determinación estructural biomoléculas python

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Algoritmos bioinformáticos

Epistemología (10/2014 - 11/2014)

Sector Extranjero/Internacional/Otros / Universidad Nacional de San Luis / Facultad de Ciencias Humanas , Argentina

60 horas

Palabras Clave: epistemología historia de la ciencia filosofía

Areas de conocimiento:

Humanidades / Filosofía, Ética y Religión / Filosofía, Historia y Filosofía de la Ciencia y la Tecnología / Historia y filosofía de la ciencia

Introducción al modelado molecular (09/2013 - 10/2013)

Sector Extranjero/Internacional/Otros / Universidad Nacional de San Luis / Facultad de Química, Bioquímica y Farmacia, Argentina

60 horas

Palabras Clave: modelado estructural moléculas docking

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Modelado molecular

Fundamentos de biología molecular (07/2013 - 08/2013)

Sector Extranjero/Internacional/Otros / Universidad Nacional de San Luis, Argentina

60 horas

Palabras Clave: Biología Molecular

Áreas de conocimiento:

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

La escritura de artículos de investigación en inglés para ciencias experimentales (04/2013 - 06/2013)

Sector Extranjero/Internacional/Otros / Universidad Nacional de San Luis, Argentina

60 horas

Palabras Clave: escritura científica inglés artículos de investigación

Áreas de conocimiento:

Humanidades / Lengua y Literatura / Lenguajes Específicos / Inglés

Espectroscopía de RMN de Biomoléculas (05/2012 - 06/2012)

Sector Extranjero/Internacional/Otros / Instituto de Biología Molecular y Celular de Rosario / Facultad de Ciencias Bioquímicas y Farmacéuticas, Argentina

120 horas

Palabras Clave: RMN espectroscopía biomoléculas desplazamientos químicos determinación estructuras

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biología Celular, Microbiología / Biología estructural

Principios de los sistemas poliméricos (08/2010 - 12/2010)

Sector Extranjero/Internacional/Otros / Universidad Nacional de San Luis / Facultad de Química, Bioquímica y Farmacia, Argentina

60 horas

Palabras Clave: sistemas poliméricos polímeros

Áreas de conocimiento:

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

PARTICIPACIÓN EN EVENTOS

PyData SanLuis 2017 (2017)

Tipo: Congreso

Institución organizadora: Instituto de Matemática Aplicada San Luis / Universidad Nacional de San Luis, Argentina

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Procesamiento de información usando Python

GlycoAR 2016 - Segundo simposio argentino de glicobiología (2016)

Tipo: Congreso

Institución organizadora: Instituto Leloir/IBYME/CIQUIBIC/CONICET/Sociedad Latinoamericana de glicobiología, Argentina

Áreas de conocimiento:

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

GlycoAR 2014 - Primer simposio argentino de glicobiología (2014)

Tipo: Congreso

Institución organizadora: Instituto Leloir, Argentina

Áreas de conocimiento:

Fronteras en Resonancia Magnética, de los materiales a los sistemas biológicos (2013)

Tipo: Simposio

Institución organizadora: Instituto de Biología Molecular y Celular de Rosario, Argentina

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Determinación estructural de biomoléculas

SAB 2012: XLI Reunión Anual de la Sociedad Argentina de Biofísica (2012)

Tipo: Congreso

Institución organizadora: Sociedad Argentina de Biofísica, Argentina

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática estructural

LIV Reunión Científica Anual de la Sociedad Argentina de Investigación Clínica y la LVII Reunión Científica de la Sociedad Argentina de Inmunología (2009)

Tipo: Congreso

Institución organizadora: Sociedades Argentinas de Investigación Clínica e Inmunología, Argentina

Áreas de conocimiento:

Ciencias Médicas y de la Salud / Medicina Clínica / Andrología /

VII Jornadas Nacionales de Extensión Universitaria (2008)

Tipo: Otro

Institución organizadora: Universidad nacional de San Luis, Argentina

Áreas de conocimiento:

Ciencias Médicas y de la Salud / Ciencias de la Salud / Ciencias de la Salud / Efectos de los andrógenos sobre la calidad de vida

OTRAS INSTANCIAS

Curso de LaTeX (2016)

Argentina

Palabras Clave: LaTeX texto Beamer presentaciones documentos

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Computación / Uso de LaTeX para la escritura de documentos y presentaciones

EN MARCHA

POSDOCTORADOS

Postdoctorales por el CONICET y el Institut Pasteur de Montevideo (2017)

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

Financiación:

CONICET , Argentina

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Dinámica molecular de grano grueso

Idiomas

Inglés

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

Áreas de actuación

CIENCIAS NATURALES Y EXACTAS

Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática

/Bioinformática estructural

CIENCIAS NATURALES Y EXACTAS

Ciencias de la Computación e Información /Ciencias de la Información y Bioinformática /Dinámicas moleculares

CIENCIAS NATURALES Y EXACTAS

Ciencias Biológicas /Biofísica /Determinación estructural de biomoléculas

CIENCIAS NATURALES Y EXACTAS

Ciencias Biológicas /Bioquímica y Biología Molecular /Biología Molecular

Actuación profesional

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

Institut Pasteur de Montevideo / Laboratorio de simulaciones biomoleculares

VÍNCULOS CON LA INSTITUCIÓN

Becario (12/2017 - a la fecha) Trabajo relevante

Becario posdoctoral ,45 horas semanales / Dedicación total

SECTOR EXTRANJERO/INTERNACIONAL/OTROS - ARGENTINA

Instituto de Matemática Aplicada San Luis / Grupo de Bioinformática estructural

VÍNCULOS CON LA INSTITUCIÓN

Becario (04/2012 - 11/2017) Trabajo relevante

Becario doctorail ,45 horas semanales / Dedicación total

SECTOR EXTRANJERO/INTERNACIONAL/OTROS - ARGENTINA

Universidad Nacional de Villa Mercedes / Escuela de ciencias de la salud

VÍNCULOS CON LA INSTITUCIÓN

Funcionario/Empleado (02/2013 - 04/2013)

Auxiliar de primera simple ,20 horas semanales

SECTOR EXTRANJERO/INTERNACIONAL/OTROS - ARGENTINA

Universidad Nacional de San Luis / Facultad de Química, Bioquímica y Farmacia

VÍNCULOS CON LA INSTITUCIÓN

Otro (11/2011 - 03/2012)

Pasante de investigación ,20 horas semanales

Pasantía de Investigación en laboratorio de Bromatología, Proyecto PROICO 2-8002, Facultad de Química Bioquímica y Farmacia, Universidad Nacional de San Luis.

Otro (11/2010 - 11/2011)

Auxiliar de primera Ad-Honorem ,20 horas semanales

Otro (09/2010 - 11/2010)

Pasante de investigación ,20 horas semanales

Pasantía de Investigación en INTEQUI: Proyecto PROICO 2-9304, FQByF, UNSL.

Otro (06/2009 - 06/2010)

Auxiliar de primera Ad-Honorem ,20 horas semanales

CARGA HORARIA

Carga horaria de docencia: Sin horas

Carga horaria de investigación: 45 horas

Carga horaria de formación RRHH: Sin horas

Carga horaria de extensión: Sin horas

Carga horaria de gestión: Sin horas

Producción científica/tecnológica

Producción bibliográfica

ARTÍCULOS PUBLICADOS

ARBITRADOS

Post-Translational Modifications at the Coarse-Grained Level with the SIRAH Force Field (Completo, 2020)

Garay, Pablo G , Exequiel E. Barrera , Pantano, Sergio

Journal of Chemical Information and Modeling, 2020

Palabras clave: MOLECULAR DYNAMIC SIRAH FORCE FIELD POST-TRANSLATIONAL MODIFICATIONS COARSE-GRAINED

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Bioinformática

Medio de divulgación: Internet

ISSN: 15499596

DOI: [10.1021/acs.jcim.9b00900](https://doi.org/10.1021/acs.jcim.9b00900)

<https://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/acs.jcim.9b00900>

Scopus® WEB OF SCIENCE™

Finite Dimension: A Mathematical Tool to Analyse Glycans (Completo, 2018) Trabajo relevante

Alonso, Juan M. , Arroyuelo, Agustina , Garay, Pablo G , Martin, Osvaldo A. , Vila, Jorge A.

Scientific Reports, v.: 8 1 , p.:4426 2018

Palabras clave: finite dimension glycan structure Glycan Space mathematical graphs

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Matemáticas / Matemática Aplicada / Dimensión finita para el análisis de secuencias primarias de glicanos

Medio de divulgación: Internet

ISSN: 20452322

DOI: [10.1038/s41598-018-22575-4](https://doi.org/10.1038/s41598-018-22575-4)

<https://www.nature.com/articles/s41598-018-22575-4>

Scopus® WEB OF SCIENCE™

CheSweet: An application to predict glycan's chemicals shifts (Completo, 2018) Trabajo relevante

Garay, Pablo G , Vila, Jorge A. , Martin, Osvaldo A.

The Journal of Open Source Software, 2018

Palabras clave: predict glycan chemicals shifts python glycosidic torsional structure

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática estructural

Medio de divulgación: Internet

ISSN: 24759066

DOI: [10.21105/joss.00488](https://doi.org/10.21105/joss.00488)

Detection of methylation, acetylation and glycosylation of protein residues by monitoring ^{13}C chemical-shift changes: A quantum-chemical study (Completo, 2016) Trabajo relevante

Garay, Pablo G , Martin Osvaldo A. , Scheraga Harold A. , Vila Jorge A.

PeerJ, v.: 4 2016

Palabras clave: Post-translational modifications Methylation Glycosylation Acetylation Protein Glycan Chemical shift DFT

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Detección de modificaciones post-traduccionales

Medio de divulgación: Internet

ISSN: 21678359

DOI: [10.7717/peerj.2253](https://doi.org/10.7717/peerj.2253)

<https://peerj.com/articles/2253/>

Scopus® WEB OF SCIENCE™

Factors affecting the computation of the ^{13}C shielding in disaccharides (Completo, 2014) Trabajo relevante

Garay, Pablo G , Martin Osvaldo A. , Scheraga Harold A. , Vila Jorge A.

Journal of Computational Chemistry, v.: 35 25 , p.:1854 - 1864, 2014

Palabras clave: glycans quantum?chemical calculation of ^{13}C ?shieldings validation of glycan structures glycoproteins

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Determinación estructural de glicanos

Medio de divulgación: Internet

ISSN: 01928651

DOI: [10.1002/jcc.23697](https://doi.org/10.1002/jcc.23697)

<http://doi.wiley.com/10.1002/jcc.23697>

Scopus® WEB OF SCIENCE™

Producción técnica

PRODUCTOS

CheSweet: chemical shifts for glycans (2018) Trabajo relevante

Software, Otra

Garay, Pablo G , Vila, Jorge A. , Martin, Osvaldo A.

A Python module for accurate and fast computation of Chemical Shifts.

País: Argentina

Disponibilidad: Irrestringida

Palabras clave: predict glycan chemicals shifts python

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática estructural

Medio de divulgación: Internet

<https://github.com/BIOS-IMASL/chesweet>

Otras Producciones

DESARROLLO DE MATERIAL DIDÁCTICO O DE INSTRUCCIÓN

Guía de trabajos Teórico-Práctico para la asignatura: Introducción a la Biología (2011)

Salinas, Eloy , Sanchez, Susana , Gil, Angélica , Garay, Pablo G

País: Argentina

Idioma: Español

Medio divulgación: Papel

Material didáctico para nivel universitario introductorio a Biología.

Areas de conocimiento:

Otros datos relevantes

PRESENTACIONES EN EVENTOS

XLVIII Reunión Anual de la Sociedad Argentina de Biofísica (2019)

Congreso

Glycans are one of the most structurally and functionally diverse molecules in nature. Their structures range from simple mono or disaccharides to more complex structures like chains, branched structures, oligosaccharides or polysaccharides, and could bond to other biological molecules like proteins and lipids to form glycoproteins and glycolipids. One of the principal tools to complement experimental studies is the use of molecular dynamics (MD) simulation. Nevertheless, the computational cost of simulating large glycosylated proteins or chains with realistically long polysaccharides with polymerization degrees in the order of 10⁵ poses significant challenges to fully atomistic MD simulations. A workaround to this limitation is the development of coarse grain (CG) models. CG representations reduce the number of atoms in the system making them less computational demanding but still preserving salient features of the molecules of interest. Our group develops the SIRAH force field (Southamerican Initiative for a Rapid and Accurate Hamiltonian, www.sirahff.com) which contains parameters for DNA, proteins, solvents, ions, and lipids. Here, show the development of the first glycan model at the CG level that allows simulations of polysaccharides and/or glycosylated proteins in an unbiased and consistent manner. Moreover, we provide a fully generalizable coarse-graining rule that can be expanded to virtually any six-membered ring (pyranoses) including functionalizations and ramif

Argentina

Tipo de participación: Expositor oral

Nombre de la institución promotora: Sociedad Argentina de Biofísica

Palabras Clave: MOLECULAR DYNAMICSSIRAH FORCE FIELD POST-TRANSLATIONAL MODIFICATION COARSE-GRAINED

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Bioinformática

PyData SanLuis 2017 (2017)

Congreso

Glycan structure determination using CheSweet and Bayesian inference

Argentina

Tipo de participación: Poster

Nombre de la institución promotora: Instituto de Matemática Aplicada San Luis / Universidad Nacional de San Luis

Areas de conocimiento:

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

GlycoAR 2016 - Segundo simposio argentino de glicobiología (2016)

Congreso

Detection of glycosylation of protein residues by monitoring 13 C chemical- shift changes

Argentina

Tipo de participación: Poster

Areas de conocimiento:

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

GlycoAR 2014 - Primer simposio argentino de glicobiología (2014)

Congreso

CheSweet: first steps into validating and determining glycan structures

Argentina

Tipo de participación: Poster

Areas de conocimiento:

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

Fronteras en Resonancia Magnética, de los materiales a los sistemas biológicos (2013)

Taller

Towards a unified methodology to validate glycoproteins

Argentina
Tipo de participación: Poster
Nombre de la institución promotora: Instituto de Biología Molecular y Celular de Rosario
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Determinación estructural de biomoléculas

SAB 2012: XLI Reunión Anual de la Sociedad Argentina de Biofísica (2012)

Congreso
Conformational Preferences of Glycans from the Use of ¹³C Chemical Shifts
Argentina
Tipo de participación: Poster
Nombre de la institución promotora: Sociedad Argentina de Biofísica
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Determinación estructural de glicanos

LIV Reunión Científica Anual de la Sociedad Argentina de Investigación Clínica y la LVII Reunión Científica de la Sociedad Argentina de Inmunología (2009)

Congreso
Macrófagos alveolares y estrés oxidativo en ratas castradas
Argentina
Tipo de participación: Poster
Áreas de conocimiento:
Ciencias Médicas y de la Salud / Medicina Básica / Bioquímica y Biología Molecular

VII Jornadas Nacionales de Extensión Universitaria (2008)

Congreso
Efectos de los andrógenos sobre la calidad de vida
Argentina
Tipo de participación: Poster
Nombre de la institución promotora: Universidad Nacional de San Luis
Áreas de conocimiento:
Ciencias Médicas y de la Salud / Medicina Básica / Bioquímica y Biología Molecular / Andrógenos

Información adicional

Manejo del lenguaje de programación Python y paquetes asociados para estudios bioinformáticos y tratamiento de datos como PyMOL, Pandas, NumPy, Matplotlib, Seaborn, MDAnalysis y PyMC3, entre otros.

Manejo de Gromacs, VMD y programas asociados para la realización de dinámicas moleculares.

Uso de software libre en toda actividad académica.

Indicadores de producción

PRODUCCIÓN BIBLIOGRÁFICA	5
Artículos publicados en revistas científicas	5
Completo	5
PRODUCCIÓN TÉCNICA	2
Productos tecnológicos	1
Otros tipos	1