



JENNER NATHANIEL
BONANATA SILVA

Doctor



jbonanata@fcien.edu.uy

SNI

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas

Categorización actual: Nivel I (Activo)

Fecha de publicación: 05/11/2025
Última actualización: 17/07/2025

Datos Generales

INSTITUCIÓN PRINCIPAL

Universidad de la República/ Facultad de Ciencias / Instituto de Química Biológica / Uruguay

DIRECCIÓN INSTITUCIONAL

Institución: Universidad de la República / Facultad de Ciencias / Sector Educación Superior/Público / Instituto de Química Biológica

Dirección: Iguá 4225 / 11400

País: Uruguay / Montevideo / Montevideo

Teléfono: 25258618 / 106

Correo electrónico/Sitio Web: jbonanata@fcien.edu.uy

Formación

Formación académica

CONCLUIDA

DOCTORADO

Doctorado en Química (UDELAR-PEDECIBA) (2011 - 2017)

Universidad de la República - Facultad de Química , Uruguay

Título de la disertación/tesis/defensa: Albúmina sérica humana: Oxidación del tiol y glicación

Tutor/es: Dra. E. Laura Coitiño, Dra. Beatriz Álvarez

Descripción del título obtenido: Doctor en Química

Obtención del título: 2017

Financiación:

Agencia Nacional de Investigación e Innovación / Agencia Nacional de Investigación e Innovación , Uruguay

Palabras Clave: Albúmina QM/MM Tioles Especies reactivas del oxígeno

Áreas de conocimiento:

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

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

Electroquímica / Química Teórica y Computacional

GRADO

Licenciatura en Bioquímica (2005 - 2011)

Universidad de la República - Facultad de Ciencias , Uruguay

Título de la disertación/tesis/defensa: Modelado de la formación de radicales del sustrato en el sitio activo de la etanolamina amonio liasa

Tutor/es: Elena Laura Coitiño Izaguirre

Obtención del título: 2011

Sitio web de la disertación/tesis/defensa: <http://iqb.fcien.edu.uy/>

Palabras Clave: Catálisis radical DFT Abstracción de hidrógeno

Áreas de conocimiento:

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

Electroquímica / Química Teórica y Computacional

Formación complementaria

CONCLUIDA

CURSOS DE CORTA DURACIÓN

VIII POSLATAM Course: Membrane lipids, transporters, channels and all that crosstalk (01/2015 - 01/2015)

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

30 horas

Palabras Clave: Proteínas de membrana Simulaciones moleculares Lípidos de membrana Interacciones lípido-proteína

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biología estructural

PARTICIPACIÓN EN EVENTOS

13th Triennial Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists (WATOC 2025) (2025)

Tipo: Congreso

Institución organizadora: World Association of Theoretical and Computational Chemists, Noruega

Alcance geográfico: Internacional

Áreas de conocimiento:

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

LII Reunión Anual de la Sociedad Argentina de Biofísica (2024)

Tipo: Congreso

Institución organizadora: Sociedad Argentina de Biofísica, Argentina

Alcance geográfico: Regional

Áreas de conocimiento:

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

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

Electroquímica / Química Teórica y Computacional

Electronic Structure Principles and Applications and biannual Meeting of the RSEQ Group in Chemistry and Computation (ESPA 2024) (2024)

Tipo: Congreso

Institución organizadora: Universitat Rovira i Virgili, España

Alcance geográfico: Internacional

Áreas de conocimiento:

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

Electroquímica / Química Teórica y Computacional

9th Symposium on Theoretical Biophysics (TheoBio2023) (2023)

Tipo: Simposio

Institución organizadora: Università della Calabria, Italia

Alcance geográfico: Internacional

Áreas de conocimiento:

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

Electroquímica /

LI Reunión Anual de la Sociedad Argentina de Biofísica (2023)

Tipo: Congreso

Institución organizadora: Sociedad Argentina de Biofísica, Argentina

Alcance geográfico: Regional

Áreas de conocimiento:

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

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

Electroquímica / Química Teórica y Computacional

VII Simposio CEINBIO (2022)

Tipo: Simposio

Institución organizadora: Centro de Investigaciones Biomédicas, Universidad de la República,

Uruguay

Áreas de conocimiento:

Séptimo Encuentro Nacional de Química (2021)

Tipo: Encuentro

Institución organizadora: PEDECIBA Química, Uruguay

III Jornadas de Enseñanza de la Biología a Nivel Superior (2019)

Tipo: Encuentro

Institución organizadora: ANEP, Uruguay

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Ciencias Biológicas /

XLIV Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina (2018)

Tipo: Congreso

Institución organizadora: Pontificia Universidad Católica de Chile, Chile

Palabras Clave: Química Cuántica Simulación computacional Modelado computacional

Áreas de conocimiento:

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

10th Congress on Electronic Structure: Principles and Applications (2016)

Tipo: Congreso

Institución organizadora: Universitat Jaume I, España

Palabras Clave: DFT QM/MM Estructura electrónica

Áreas de conocimiento:

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

XLII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina (2016)

Tipo: Congreso

Institución organizadora: Universidad de la República, Uruguay

Palabras Clave: DFT Modelado Computacional Dinámica molecular Química cuántica

Áreas de conocimiento:

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

Thiol Metabolism and Redox Regulation of Cellular Functions (2015)

Tipo: Congreso

Institución organizadora: International Centre for Genetic Engineering and Biotechnology, Uruguay

Palabras Clave: Tioles Redox

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular / Química y biología redox

Latin American Crosstalk in Biophysics and Physiology/3as Jornadas de +Biofísica (2015)

Tipo: Congreso

Institución organizadora: Latin American Federation of Biophysical Societies, Uruguay

Palabras Clave: Proteínas de membrana Simulaciones moleculares Lípidos de membrana

Interacciones lípido-proteína

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica /

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

10th Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists (2014)

Tipo: Congreso

Institución organizadora: World Association of Theoretical and Computational Chemists, Chile

Palabras Clave: DFT Dinámica molecular Química cuántica

Áreas de conocimiento:

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

2as Jornadas de +Biofísica (2013)

Tipo: Congreso
Institución organizadora: Sociedad Uruguaya de Biofísica, Uruguay
Palabras Clave: Biofísica
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica /

VIII Meeting of the Society Free Radical Biology and Medicine-South American Group (2013)

Tipo: Congreso
Institución organizadora: Society Free Radical Biology and Medicine-South American Group, Argentina
Palabras Clave: Radicales libres
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular / Biología de radicales libres

3er Encuentro Nacional de Ciencias Químicas (2013)

Tipo: Congreso
Institución organizadora: PEDECIBA Química, Uruguay
Palabras Clave: Química
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica /

XIV Jornadas de la SUB (2012)

Tipo: Congreso
Institución organizadora: Sociedad Uruguaya de Biociencias, Uruguay
Palabras Clave: Bioquímica
Áreas de conocimiento:
Ciencias Médicas y de la Salud / Medicina Básica / Bioquímica y Biología Molecular /

1as Jornadas de +Biofísica (2012)

Tipo: Congreso
Institución organizadora: Sociedad Uruguaya de Biofísica, Uruguay
Palabras Clave: Biofísica
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biología estructural

Segundo Encuentro Nacional de Ciencias Químicas (2011)

Tipo: Congreso
Institución organizadora: Universidad de la República, Uruguay
Palabras Clave: Química
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica /

Jornadas de Seminarios del IQB (2010)

Tipo: Seminario
Institución organizadora: Instituto de Química Biológica - Facultad de Ciencias - UdelaR, Uruguay
Palabras Clave: Bioquímica
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular /

Idiomas

Inglés

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

Italiano

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

Español

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

Portugués

Entiende bien / Habla regular / Lee bien / Escribe regular

Áreas de actuación

CIENCIAS NATURALES Y EXACTAS

Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular / Enzimología

CIENCIAS NATURALES Y EXACTAS

Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica Computacional

CIENCIAS NATURALES Y EXACTAS

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

Actuación profesional

SECTOR EXTRANJERO/INTERNACIONAL/OTROS - ESPAÑA

Universitat de Valencia / Facultat de Química

VÍNCULOS CON LA INSTITUCIÓN

Colaborador (06/2025 - a la fecha)

Colaborador 40 horas semanales

Colaborador (06/2024 - 08/2024)

Pasante de investigación 40 horas semanales

Colaborador (07/2023 - 07/2023)

Pasante de investigación 40 horas semanales

Colaborador (07/2019 - 07/2019)

Pasante de investigación 40 horas semanales

ACTIVIDADES

PASANTÍAS

Simulación computacional de la formación de complejos de transferencia de carga tiolato-FAD en glutatión reductasa humana (06/2025 - a la fecha)

Departamento de Química Física, Efectos del Medio

40 horas semanales

Áreas de conocimiento:

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

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

Electroquímica / Química Teórica y Computacional

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

Elucidación del mecanismo de la formación del aducto Cys-S-FADH en el ciclo catalítico de la glutatión reductasa humana (06/2024 - 08/2024)

Facultad de Química, Efectos del Medio

40 horas semanales

Áreas de conocimiento:

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

Electroquímica / Química Teórica y Computacional

Aproximación al método de la cuerda y modelado QM/MM con fDynamo/Gaussian (07/2023 - 07/2023)

Facultat de Química, Departament de Química Física

40 horas semanales

Áreas de conocimiento:

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

Estudio de la reacción entre NADPH y FAD mediante dinámica molecular QM/MM (umbrella sampling) con fDynamo (07/2019 - 07/2019)

Facultad de Química, Efectos del Medio - Departamento de Química Física

40 horas semanales

Áreas de conocimiento:

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

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

Facultad de Ciencias / Instituto de Química Biológica

VÍNCULOS CON LA INSTITUCIÓN

Funcionario/Empleado (02/2024 - a la fecha) Trabajo relevante

Asistente del Instituto de Química Biológica 30 horas semanales / Dedicación total

Escalafón: Docente

Cargo: Efectivo

Funcionario/Empleado (04/2019 - 02/2024) Trabajo relevante

Asistente de Química Teórica y Computacional 30 horas semanales / Dedicación total

En Régimen de Dedicación Total desde el 01/02/2021

Escalafón: Docente

Grado: Grado 2

Cargo: Efectivo

Funcionario/Empleado (05/2018 - 03/2019) Trabajo relevante

Asistente de Química Teórica y Computacional 20 horas semanales

Extensión horaria de 20 a 40 hs con fondos de proyecto FCE_3_2016_1_125514

Escalafón: Docente

Grado: Grado 2

Cargo: Interino

Funcionario/Empleado (08/2017 - 03/2019)

Ayudante de Química Teórica y Computacional 20 horas semanales

Apartamiento de carrera de mayo de 2018 a marzo de 2019.

Escalafón: Docente

Grado: Grado 1

Cargo: Efectivo

Funcionario/Empleado (04/2017 - 07/2018)

Asistente 30 horas semanales

Responsable Proyecto FCE_3_2016_1_125514

Escalafón: Docente

Grado: Grado 2

Cargo: Interino

Funcionario/Empleado (05/2016 - 10/2017)

Ayudante de Química Teórica y Computacional 20 horas semanales

Escalafón: Docente

Grado: Grado 1

Cargo: Interino

Becario (03/2014 - 08/2016)

Becario de Doctorado - ANII 30 horas semanales
Beca de Posgrados Nacionales - ANII
Escalafón: No Docente
Cargo: Interino

Funcionario/Empleado (11/2015 - 12/2015)

Asistente de Química Teórica y Computacional 20 horas semanales
Escalafón: Docente
Grado: Grado 2
Cargo: Interino

Becario (03/2012 - 02/2014)

Becario de Maestría - ANII 30 horas semanales
Beca de Posgrados Nacionales - ANII
Escalafón: No Docente
Cargo: Interino

Colaborador (07/2011 - 02/2012)

Investigador Honorario 20 horas semanales
Pasante de investigación en el Laboratorio de Química Teórica y Computacional bajo orientación de la Dra. Laura Coitiño.
Escalafón: No Docente
Cargo: Interino

Becario (07/2010 - 06/2011)

Becario ININ (ANII) 20 horas semanales
Beca ININ "Estudio mediante métodos mixtos QM/MM (ONIOM) de la abstracción de hidrógeno de la etanolamina por el radical adenosilo en el sitio activo de la etanolamina amonio liasa" bajo la orientación de la Dra. Laura Coitiño.
Escalafón: No Docente
Cargo: Interino

Colaborador (01/2010 - 06/2010)

Investigador Honorario 15 horas semanales
Pasante de investigación en el Laboratorio de Química Teórica y Computacional bajo orientación de la Dra. Laura Coitiño.
Escalafón: No Docente
Cargo: Interino

Funcionario/Empleado (09/2009 - 12/2009)

Ayudante de Química Teórica y Computacional 20 horas semanales
Proyecto CSE "Fomentando la metacognición y el desarrollo de pensamiento autónomo y crítico desde ambientes de aprendizaje cooperativo/colaborativo de Físicoquímica Moderna".
Escalafón: Docente
Grado: Grado 1
Cargo: Interino

Colaborador (03/2009 - 09/2009)

Investigador Honorario 10 horas semanales
Pasante de investigación en el Laboratorio de Química Teórica y Computacional bajo orientación de la Dra. Laura Coitiño.
Escalafón: No Docente
Cargo: Interino

ACTIVIDADES

LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN

Mecanismos catalíticos de flavoproteínas con dos dominios de unión de dinucleótidos (04/2017 - a la fecha)

Las flavoproteínas con dos dominios de unión de dinucleótidos (tDBDF) constituye una familia de enzimas que usan FAD como cofactor catalizan la reducción de diversos sustratos con electrones

provenientes del NAD(P)H, con la excepción de las sulfuro deshidrogenasas que usan H₂S como dador de electrones. Las tDBDFs tienen diversas funciones, entre ellas mantener en estado reducido especies antioxidantes (ej.: glutatión, tiorredoxina, ascorbato), la señalización redox y la detoxificación de especies tanto oxidantes como no oxidantes. Es de destacar que algunas tDBDFs (ej.: tiorredoxina reductasa) son potenciales blancos para el desarrollo de fármacos con potencial antiparasitario. Por dicha razón es de suma importancia comprender los mecanismos catalíticos de las tDBDFs. En esta línea se plantea, mediante modelado y simulación computacional, estudiar los mecanismos catalíticos de las flavoproteínas de unión de dinucleótidos.

Fundamental

20 horas semanales

Instituto de Química Biológica, Coordinador o Responsable

Equipo: BONANATA, J.

Áreas de conocimiento:

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

PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN Y DESARROLLO

Búsqueda de antivirales de bajo costo para COVID-19: análisis in silico de la interacción de la proteína S del SARS-CoV-2 con moléculas componentes de un medicamento de origen natural eficaz contra enfermedades respiratorias (07/2020 - 06/2021)

Estudio de la interacción de una selección de productos naturales con la proteína Spike

10 horas semanales

Instituto de Química Biológica, Laboratorio de Química Teórica y Computacional

Investigación

Integrante del Equipo

Concluido

Financiación:

Comisión Sectorial de Investigación Científica, Uruguay, Apoyo financiero

Equipo: BONANATA, J., E. Laura Coitiño (Responsable), S Sastre, Fabiana Salazar

Palabras clave: Dinámica molecular SARS-CoV-2 Proteína Spike

Áreas de conocimiento:

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

Sulfuro-quinona oxidoreductasa: Buscando las causas de la extraordinaria aceleración de una reacción química (03/2017 - 05/2019)

Aunque el sulfuro de hidrógeno (H₂S) ha sido considerado tradicionalmente como un gas tóxico, en las últimas décadas se han identificado papeles señalizadores que modulan procesos fisiológicos en mamíferos, además de ser sintetizado y oxidado por éstos. El H₂S puede reaccionar con disulfuros y ácidos sulfénicos (derivados oxidados de tioles) formando persulfuros, especies en general de vida corta, con carácter tanto nucleófilo como electrófilo, involucradas en el metabolismo del H₂S, el transporte de azufre y en la catálisis enzimática. En mamíferos, la oxidación del H₂S se da fundamentalmente en la mitocondria, y el primer paso de ésta está catalizado por la sulfuro-quinona oxidoreductasa (SQR), enzima que cataliza la oxidación del H₂S acoplada a la reducción de ubiquinona, usando FAD como cofactor. En algunas bacterias, SQR que cataliza la formación de polisulfuros y azufre elemental, mientras que en mamíferos la SQR requiere un sustrato adicional, como glutatión, H₂S o sulfito, para producir glutatión persulfuro, H₂S₂ o tiosulfato. Los mecanismos de las diferentes SQR tienen la misma primera etapa, el ataque nucleofílico del H₂S, más precisamente SH⁻, sobre un disulfuro ubicado en el sitio activo, para dar un tiolato y un persulfuro. Este proceso en la SQR sufre una aceleración extraordinaria: ocurre 5-7 órdenes de magnitud más rápido que en disulfuros de bajo peso molecular. En este proyecto se plantea, mediante modelado QM/MM, estudiar la oxidación de H₂S en el sitio activo de las SQR, para determinar qué causa tan extraordinaria aceleración. Asimismo se plantea comprender mejor la química de los persulfuros.

30 horas semanales

Instituto de Química Biológica, Laboratorio de Química Teórica y Computacional

Investigación

Coordinador o Responsable

Concluido

Financiación:

Agencia Nacional de Investigación e Innovación, Uruguay, Apoyo financiero

Equipo: COITIÑO, E. L., ÁLVAREZ, B.

Palabras clave: Tioles biológicos Persulfuros Catabolismo del sulfuro de hidrógeno

Áreas de conocimiento:

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

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

Efectos de la glicación por metilglioxal sobre propiedades de la albúmina humana y su tiol libre (04/2014 - 10/2015)

La albúmina sérica humana (HSA) es la proteína plasmática más abundante, representando un 60% del total de proteínas en plasma. Posee 17 puentes disulfuro y un solo residuo de cisteína libre, Cys34, que representa el 80% del total de tioles libres en plasma, y reacciona con oxidantes como peróxido de hidrógeno y peroxinitrito para formar ácido sulfénico, y con especies radicalarias para formar radicales tiolo. La glicación es un tipo de modificación -no enzimática- de las proteínas en la cual agentes glicantes (azúcares, oxoaldehídos) reaccionan con residuos de Arg, Lys y Cys formando aductos -productos intermedios y avanzados de glicación-. Estas modificaciones son irreversibles y alteran la estructura y función de las proteínas. El metilglioxal es un oxoaldehído altamente reactivo cuya concentración aumenta en diabetes. Dada su larga vida media (alrededor de 21 días) y su alta concentración, la HSA es un blanco importante de los agentes glicantes en plasma. La glicación altera las propiedades de la HSA, entre ellas su capacidad antioxidante. Esto puede deberse a cambios conformacionales que afecten la reactividad del tiol o a que este último reacciona con agentes glicantes. En el presente proyecto se plantea realizar un abordaje mixto, experimental y computacional, integrando los esfuerzos de dos grupos de investigación diferentes ("Físicoquímica Biológica-Enzimología" 46725 y "Química Teórica y Computacional de Sistemas Complejos-LQTC" 708725) para explorar algunas cuestiones relacionadas a las propiedades de la HSA y su tiol cuando ésta es modificada por metilglioxal. Este doble abordaje permitirá realizar un diálogo de ida y vuelta entre el modelado computacional y los experimentos de laboratorio, complementándose mutuamente, en el contexto de la realización de estudios de Posgrado. En particular se realizarán experimentos de cinética para la actividad experimental, y cálculos de dinámica molecular y QM/MM para el modelado computacional. Se plantea estudiar las reacciones del tiol de la HSA -previamente expuesta a metilglioxal- con peróxidos y 5,5-ditiobis(2-nitrobenzoato), y la reacción del tiol con metilglioxal para formar el aducto carboxietilcisteína. Considerando que las formas glicadas y oxidadas de la albúmina están presentes in vivo y aumentan en diferentes patologías, y que la albúmina posee importancia farmacológica, es de esperar que este proyecto permita comprender los mecanismos subyacentes a la oxidación del tiol e impacten a nivel biomédico y farmacéutico.

30 horas semanales

Instituto de Química Biológica, Laboratorio de Química Teórica y Computacional

Investigación

Coordinador o Responsable

Concluido

Financiación:

Comisión Sectorial de Investigación Científica, Uruguay, Apoyo financiero

Equipo: ALVAREZ, B., BONANATA, J. (Responsable), COITIÑO, E. L.

Palabras clave: Albúmina Tioles biológicos Glicación Estrés oxidativo

Áreas de conocimiento:

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

Aproximación teórica y experimental a propiedades del tiol de la albúmina sérica humana (04/2012 - 04/2012)

La albúmina sérica humana (HSA) es la proteína plasmática más abundante, representando un 60% del total de proteínas en plasma. Posee 17 puentes disulfuro y un solo residuo de cisteína libre, Cys34, que representa el 80% del total de tioles libres en plasma. El valor de pKa de este tiol es controversial y podría estar afectado por cambios conformacionales en la proteína. El tiolato reacciona con oxidantes como peróxido de hidrógeno y peroxinitrito para formar un ácido sulfénico relativamente estable, el cual constituye un buen modelo para estudiar las propiedades de intermediarios sulfénicos proteicos. El ácido sulfénico formado en la albúmina reacciona con otra molécula de peróxido de hidrógeno para formar ácido sulfínico y con tioles de bajo peso molecular para formar disulfuros mixtos. También decae espontáneamente en amortiguador fosfato, formando un producto aún no identificado, que podría ser una sulfenamida (L. Turell, Biochemistry 2008, 47, 358-367). En el presente proyecto se plantea realizar un abordaje mixto, experimental y teórico, integrando los esfuerzos de dos grupos de investigación diferentes ("Físicoquímica Biológica-Enzimología" 46725 y "Química Teórica y Computacional de Sistemas Complejos-LQTC" 708725) para explorar algunas cuestiones relacionadas a las propiedades del tiol y su derivado ácido sulfénico. Este doble abordaje permitirá realizar un diálogo de ida y vuelta entre el modelado computacional y los experimentos de laboratorio, fortaleciéndose y complementándose

mutuamente, en el contexto de la realización de estudios de Posgrado. En concreto, se aplicará espectroscopía infrarroja para determinar el pKa del tiol y caracterizar los productos de oxidación. Asimismo, se explorarán los mecanismos de las reacciones del tiol y su derivado sulfénico con peróxido de hidrógeno. Considerando que las formas oxidadas de la albúmina están presentes in vivo y aumentan en diferentes patologías, y que la albúmina posee importancia farmacológica, es de esperar este proyecto permita comprender los mecanismos subyacentes a la oxidación del tiol e impacten a nivel biomédico y farmacéutico.

25 horas semanales

Instituto de Química Biológica, Laboratorio de Química Teórica y Computacional
Investigación

Coordinador o Responsable

Cancelado

Financiación:

Comisión Sectorial de Investigación Científica, Uruguay, Apoyo financiero

Equipo: COITIÑO, L., ALVAREZ, B., BONANATA, J. (Responsable)

Palabras clave: Albúmina Tioles Redox

Areas de conocimiento:

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

DOCENCIA

Licenciatura en Bioquímica (08/2024 - 11/2024)

Grado

Invitado

Asignaturas:

Físicoquímica Moderna - Estructura y Propiedades Moleculares, 40 horas, Teórico-Práctico

Areas de conocimiento:

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

Licenciatura en Bioquímica (08/2023 - 11/2023)

Grado

Asistente

Asignaturas:

Físicoquímica Moderna - Estructura y Propiedades Moleculares, 40 horas, Teórico-Práctico

Areas de conocimiento:

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

Posgrado en Química - Maestría y Doctorado (03/2023 - 06/2023)

Maestría

Asistente

Asignaturas:

Curso Taller de Química Computacional, 40 horas, Teórico-Práctico

Areas de conocimiento:

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

Licenciatura en Bioquímica (08/2022 - 11/2022)

Grado

Asistente

Asignaturas:

Físicoquímica Moderna - Estructura y Propiedades Moleculares, 40 horas, Teórico-Práctico

Areas de conocimiento:

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

Licenciatura en Bioquímica (08/2021 - 12/2021)

Grado

Asistente

Asignaturas:

Físicoquímica Moderna - Estructura y Propiedades Moleculares, 80 horas, Teórico-Práctico

Áreas de conocimiento:

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

Curso posgrado PEDECIBA QUIMICA (03/2021 - 06/2021)

Maestría

Asistente

Asignaturas:

Curso-Taller de Química Computacional, 56 horas, Teórico-Práctico

Áreas de conocimiento:

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

Licenciatura en Bioquímica (08/2020 - 12/2020)

Grado

Asistente

Asignaturas:

Físicoquímica Moderna - Estructura y Propiedades Moleculares, 80 horas, Teórico-Práctico

Áreas de conocimiento:

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

Licenciatura en Bioquímica (08/2019 - 12/2019)

Grado

Asistente

Asignaturas:

Físicoquímica Moderna - Estructura y Propiedades Moleculares, 80 horas, Teórico-Práctico

Áreas de conocimiento:

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

Posgrado en Química - Maestría y Doctorado (03/2019 - 06/2019)

Maestría

Asistente

Asignaturas:

Curso-Taller de Química Teórica y Computacional, 56 horas, Teórico-Práctico

Áreas de conocimiento:

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

Licenciatura en Bioquímica (08/2018 - 12/2018)

Grado

Asistente

Áreas de conocimiento:

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

Licenciatura en Bioquímica (08/2017 - 12/2017)

Grado

Asistente

Asignaturas:

Físicoquímica Moderna, 72 horas, Práctico

Áreas de conocimiento:

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

Licenciatura en Bioquímica (08/2016 - 12/2016)

Grado

Asistente

Asignaturas:

Físicoquímica Moderna - Estructura y Propiedades moleculares, 10 horas, Teórico-Práctico

Áreas de conocimiento:

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

Doctorado en Química (UDELAR-PEDECIBA) (11/2016 - 12/2016)

Doctorado

Asistente

Asignaturas:

Predicción y análisis in silico de la estructura e interacciones de proteínas, 40 horas, Teórico-Práctico

Areas de conocimiento:

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

Doctorado en Química (UDELAR-PEDECIBA) (11/2016 - 11/2016)

Perfeccionamiento

Asistente

Asignaturas:

Termoquímica y Cinética Computacional, 20 horas, Teórico-Práctico

Areas de conocimiento:

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

Licenciatura en Bioquímica (08/2010 - 12/2010)

Grado

Invitado

Asignaturas:

Fisicoquímica Moderna - Estructura y Propiedades Moleculares, 4 horas, Teórico-Práctico

Areas de conocimiento:

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

EXTENSIÓN

Jornada de Puertas Abiertas de la Facultad de Ciencias - Semana de la Ciencia y la Tecnología (09/2024 - 09/2024)

Instituto de Química Biológica, Laboratorio de Enzimología

4 horas

Latitud Ciencias (09/2023 - 09/2023)

Facultad de Ciencias, Laboratorio de Enzimología ? Instituto de Química Biológica

2 horas

Jornada de Puertas Abiertas de la Facultad de Ciencias - Semana de la Ciencia y la Tecnología (06/2022 - 06/2022)

Facultad de Ciencias, Laboratorio de Enzimología - Instituto de Química Biológica

4 horas

Zambullite en la Ciencia (02/2020 - 02/2020)

Instituto de Química Biológica, Laboratorio de Química Teórica y Computacional

20 horas

Micropasantías científico-tecnológicas (08/2019 - 08/2019)

Instituto de Química Biológica, Laboratorio de Química Teórica y Computacional

20 horas

Jornada de Puertas Abiertas de la Facultad de Ciencias (05/2019 - 05/2019)

Instituto de Química Biológica, Laboratorio de Química Teórica y Computacional

4 horas

Areas de conocimiento:

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

Visita al de estudiantes de 4° año de secundaria del Colegio Santa Elena (03/2019 - 03/2019)

Instituto de Química Biológica, Laboratorio de Química Teórica y Computacional

4 horas

Áreas de conocimiento:

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

Latitud Ciencias (08/2018 - 09/2018)

Instituto de Química Biológica, Laboratorio de Química Teórica y Computacional

4 horas

Latitud Ciencias (09/2016 - 09/2016)

Facultad de Ciencias, Instituto de Química Biológica

8 horas

Áreas de conocimiento:

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

Latitud Ciencias (07/2013 - 07/2013)

Facultad de Ciencias, Instituto de Química Biológica

6 horas

Áreas de conocimiento:

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

GESTIÓN ACADÉMICA

Delegado docente (suplente) en la Comisión Instituto de Química Biológica (03/2025 - a la fecha)

Instituto de Química Biológica, Instituto de Química Biológica

Participación en consejos y comisiones 2 horas semanales

Comisión de Informática (08/2018 - a la fecha)

Participación en consejos y comisiones 1 hora semanales

Integración de Comisión Asesora para la provisión interina de un cargo técnico en soporte informático (Esc. R, Gdo. 10, 30 hs.) para desarrollar tareas en el Servicio de Informática de la Facultad de Ciencias. (08/2024 - 10/2024)

Otros 2 horas semanales

SECTOR EXTRANJERO/INTERNACIONAL/OTROS - ARGENTINA

Universidad de Buenos Aires / Facultad de Ciencias Exactas y Naturales

VÍNCULOS CON LA INSTITUCIÓN

Otro (02/2024 - 03/2024)

Pasante de investigación 40 horas semanales

Otro (09/2015 - 10/2015)

Pasante 30 horas semanales

ACTIVIDADES

PASANTÍAS

Umbrella sampling QM/MM con AMBER/QUICK (02/2024 - 03/2024)

Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, INQUIMAE

40 horas semanales

Simulación QM/MM con LIO/AMBER (09/2015 - 10/2015)

Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Grupo de Modelado Molecular

30 horas semanales

Áreas de conocimiento:

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

SECTOR EXTRANJERO/INTERNACIONAL/OTROS - ESPAÑA

Universidad Autònoma de Barcelona / Facultat de Ciències i Biociències

VÍNCULOS CON LA INSTITUCIÓN

Otro (05/2016 - 06/2016)

Pasante 30 horas semanales

ACTIVIDADES

PASANTÍAS

Modelado QM/MM de la reacción entre el sulfenato de la HSA y peróxido de hidrógeno usando el programa ChemShell (05/2016 - 06/2016)

Facultat de Ciències i Biociències, Dinàmica i mecanismes de les reaccions químiques i bioquímiques - Departament de Química

30 horas semanales

Áreas de conocimiento:

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

CARGA HORARIA

Carga horaria de docencia: 15 horas

Carga horaria de investigación: 25 horas

Carga horaria de formación RRHH: Sin horas

Carga horaria de extensión: Sin horas

Carga horaria de gestión: Sin horas

Producción científica/tecnológica

Me inicié en la investigación científica en el Laboratorio de Química Teórica y Computacional (LQTC) del Instituto de Química Biológica donde realicé mi trabajo final de Grado, que consistió en el modelado computacional DFT de la abstracción de hidrógeno de la etanolamina por el radical 5'-desoxiadenosilo. Posteriormente, realicé mis estudios de Doctorado en el LQTC y en el Laboratorio de Enzimología del Instituto de Química Biológica, trabajando en el estudio mixto experimental-computacional de propiedades del tiol de la albúmina sérica humana y su producto de oxidación, el ácido sulfénico, siendo, además, responsable de un proyecto de Iniciación a la Investigación de CSIC enmarcado en la temática. Entre 2017 y 2019 fui responsable de un proyecto Fondo Clemente Estable de ANII, en el cual se intentó estudiar mediante modelado computacional el ciclo catalítico de la sulfuro:quinona oxidoreductasa humana, logrando modelar algunas etapas en modelos reducidos del sistema pero sin éxitos para modelar el mecanismo en la enzima, ya que la estructura experimental de ésta no se elucidó sino hasta 2019, que además reveló la presencia de un trisulfuro en el sitio activo, por lo que la hipótesis de un disulfuro catalítico de la que se partió fue errónea. Posteriormente, trabajé en el modelado DFT, usando modelos mínimos del sistema, la primera etapa del ciclo catalítico de la sulfuro:quinona oxidoreductasa. Los resultados de este trabajo se hicieron en colaboración con la Dra. Ruma Banerjee, quien lleva adelante esta línea desde el lado experimental. Paralelamente, he colaborado con la Dra. Laura Coitiño en diversas líneas (interacción de nitrolípidos con la proteína FABP4, dinámica de variantes de la proteína von Hippel-Lindau, interacción de compuestos naturales con la proteína Spike del SARS-CoV-2). Actualmente, como investigador independiente, estoy trabajando en el modelado computacional de los ciclos catalíticos de flavoproteínas con dos dominios de unión de dinucleótidos (tDBDF), habiendo publicado recientemente un trabajo que consistió en el modelado QM/MM de la influencia de una lisina del sitio activo de la glutatión reductasa humana (miembro de la familia tDBDF) sobre la reducción de FAD por NADPH (primer paso del ciclo catalítico), más específicamente en la determinación del camino de mínima energía libre de la semirreacción reductiva del ciclo catalítico

de la glutatión reductasa humana. También estoy colaborando con el Laboratorio de Enzimología y con el Grupo de Química orgánica Medicinal, ambas unidades del Instituto de Química Biológica.

Producción bibliográfica

ARTÍCULOS PUBLICADOS

ARBITRADOS

The role of the active site lysine residue on FAD reduction by NADPH in glutathione reductase (Completo, 2024)

BONANATA, J.

Computational Biology and Chemistry, v.: 110 p.:1080 2024

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 14769271

DOI: [10.1016/j.compbiolchem.2024.108075](https://doi.org/10.1016/j.compbiolchem.2024.108075)

WEB OF SCIENCE™ Scopus®

VHL-P138R and VHL-L163R novel variants: mechanisms of VHL pathogenicity involving HIF-dependent and HIF-independent actions Journal: Frontiers in Endocrinology, section Cancer Endocrinology (Completo, 2022)

MATHÓ C, Fernández, C, BONANATA, J., Liu, X-D, Martín, A, Vieites, A, Sansó, G, Barontini, M, Jonasch, E, Coitiño, EL, Pennisi, PA

Frontiers in Endocrinology, v.: 13 85436, p.:85436 2022

Palabras clave: Dinámica molecular Mutación in silico

Areas de conocimiento:

Ciencias Médicas y de la Salud / Medicina Clínica / Endocrinología y Metabolismo /

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

Medio de divulgación: Internet

E-ISSN: 16642392

DOI: [10.3389/fendo.2022.854365](https://doi.org/10.3389/fendo.2022.854365)

WEB OF SCIENCE™ Scopus®

A FABP4-PPAR γ signaling axis regulates human monocyte responses to electrophilic fatty acid nitroalkenes (Completo, 2020)

LAMAS BERVEJILLO M, BONANATA, J., FRANCHINI GR, RICHERI A, MARQUES JM, FREEMAN BA, SCHOPFER FJ, E. Laura Coitiño, CÓRSICO B, RUBBO H, FERREIRA AM

Redox Biology, v.: 29 101376, 2020

Palabras clave: Simulaciones de dinámica molecular Interacciones proteína-ligando Ácidos grasos

nitrosados

Areas de conocimiento:

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

Electroquímica / Química Teórica y Computacional

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 22132317

DOI: [10.1016/j.redox.2019.101376](https://doi.org/10.1016/j.redox.2019.101376)

WEB OF SCIENCE™ Scopus®

Dismantling and rebuilding the trisulfide cofactor demonstrates its essential role in human sulfide quinone oxidoreductase (Completo, 2020) Trabajo relevante

Landry, A. P., Moon, S, Bonanata, J., Cho, U.-S., E. Laura Coitiño, Banerjee, R.

Journal of the American Chemical Society, v.: 142 33, p.:14295 - 14306, 2020

Palabras clave: Enzimología Flavoenzimas Modelado computacional

Medio de divulgación: Internet

Lugar de publicación: Estados Unidos

ISSN: 00027863

E-ISSN: 15205126


DOI: [10.1021/jacs.0c06066](https://doi.org/10.1021/jacs.0c06066)

<https://pubs.acs.org/doi/10.1021/jacs.0c06066>


WEB OF SCIENCE™ Scopus®

Understanding the Mechanism of H₂S Oxidation by Flavin-dependent Sulfide Oxidases: A DFT/IEF-


PCM Study (Completo, 2019) Trabajo relevante

BONANATA, J., E. Laura Coitiño
Journal of Molecular Modeling, 2019
Palabras clave: flavoenzimas sulfuro de hidrógeno efectos entrópicos aducto flavina-tiol interacciones parcialmente covalentes catálisis enzimática modelado DFT
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional
Medio de divulgación: Internet
Escrito por invitación
E-ISSN: 09485023
DOI: [10.1007/s00894-019-4197-y](https://doi.org/10.1007/s00894-019-4197-y)


The thiol of human serum albumin: acidity, microenvironment and mechanistic insights on its oxidation to sulfenic acid (Completo, 2017) Trabajo relevante

BONANATA, J., TURELL, L., ANTMANN, L., FERRER-SUETA, G., BOTASINI, S., MÉNDEZ, E., ÁLVAREZ, B., COITIÑO, E. L.
Free Radical Biology and Medicine, v.: 108 p.:952 - 962, 2017
Palabras clave: Enlace de hidrógeno Tioles biológicos Oxidación de tioles Albúmina sérica Peróxido de hidrógeno Reactividad de cisteína
Áreas de conocimiento:
Ciencias Médicas y de la Salud / Medicina Básica / Bioquímica y Biología Molecular / Bioquímica Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional
Medio de divulgación: Papel
Lugar de publicación: Holanda
ISSN: 08915849
E-ISSN: 18734596
DOI: [10.1016/j.freeradbiomed.2017.04.021](https://doi.org/10.1016/j.freeradbiomed.2017.04.021)
<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0891584917302241>


Reaction of hydrogen sulfide with disulfide and sulfenic acid to form the strongly nucleophilic persulfide (Completo, 2015) Trabajo relevante

CUEVASANTA, E., LANGE, M., BONANATA, J., COITIÑO, E. L., FERRER-SUETA, G., FILIPOVIC, M. R., ÁLVAREZ, B.
Journal of Biological Chemistry, 2015
Palabras clave: Tioles Ácidos sulfénicos Sulfuro de hidrógeno Disulfuros Persulfuros Cinética
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Cinética química
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular / Química Biológica
Medio de divulgación: Papel
Lugar de publicación: Estados Unidos
ISSN: 00219258
E-ISSN: 1083351X
DOI: [10.1074/jbc.M115.672816](https://doi.org/10.1074/jbc.M115.672816)
<http://www.jbc.org/content/early/2015/08/12/jbc.M115.672816.long>


Increasing Complexity Models for Describing the Generation of Substrate Radicals at the Active Site of Ethanolamine Ammonia-Lyase/B12 (Completo, 2011)

BONANATA, J., SIGNORELLI, S., COITIÑO, E. L.
Computational and Theoretical Chemistry, v.: 975 p.:52 - 60, 2011
Palabras clave: Etanolamina amonio liasa Efectos del entorno proteico Modelo continuo polarizable PCM Catálisis por protonación Cationes radicales distónicos Modelado DFT
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular / Enzimología

Medio de divulgación: Internet
Lugar de publicación: Holanda
ISSN: 2210271X
E-ISSN: 22102728
DOI: [10.1016/j.comptc.2011.07.029](https://doi.org/10.1016/j.comptc.2011.07.029)
<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2210271X11004038>
WEB OF SCIENCE™ Scopus®

Evaluaciones

EVALUACIÓN DE PUBLICACIONES

REVISIONES

Computational Biology And Chemistry (2024)

Tipo de publicación: Revista
Cantidad: Menos de 5
Evaluación de un artículo para publicación (Ref. CBAC-D-24-01555R2).

Formación de RRHH

TUTORÍAS CONCLUIDAS

GRADO

Aportando piezas clave para entender el mecanismo de apertura de la glucopiranososa en seroalbúmina humana camino a su glicación temprana en Lys195 Trabajo relevante

Tesis/Monografía de grado
Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Ciencias , Uruguay
Programa: Licenciatura en Bioquímica
Tipo de orientación: Asesor
Nombre del orientado: Federico Ortiz
País: Uruguay
Palabras Clave: DFT Glicación Modelado molecular
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional
Nota final 12/12

Otros datos relevantes

PRESENTACIONES EN EVENTOS

13th Triennial Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists (WATOC 2025) (2025)

Congreso
QM/MM study of the oxidative half-reaction of glutathione reductase
Noruega
Tipo de participación: Poster
Carga horaria: 50
Nombre de la institución promotora: World Association of Theoretical and Computational Chemists
Alcance geográfico: Internacional Palabras Clave: Química teórica y computacional Desarrollo de métodos Aplicaciones QM/MM Machine learning Espectroscopía Teoría de los funcionales de la densidad Dinámica molecular Métodos multiescala
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática

Electronic Structure Principles and Applications and biannual Meeting of the RSEQ Group in Chemistry

and Computation (ESPA 2024) (2024)

Congreso

Role of the Active Site Lysine Residue on FAD Reduction by NADPH in Glutathione Reductase

España

Tipo de participación: Expositor oral

Carga horaria: 40

Nombre de la institución promotora: Universitat Rovira i Virgili

Alcance geográfico: Internacional Palabras Clave: Flavoproteínas QM/MM Modelado de reacciones catalizadas por enzimas

Áreas de conocimiento:

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

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

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

Electroquímica / Química Teórica y Computacional

LII Reunión Anual de la Sociedad Argentina de Biofísica (2024)

Congreso

Study of the mechanism of the oxidative half-reaction of glutathione reductase by QM/MM simulations

Argentina

Tipo de participación: Poster

Carga horaria: 20

Nombre de la institución promotora: Sociedad Argentina de Biofísica

Alcance geográfico: Local Palabras Clave: Flavoproteínas QM/MM Enzimología computacional

Áreas de conocimiento:

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

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

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

Electroquímica / Química Teórica y Computacional

LI Reunión Anual de la Sociedad Argentina de Biofísica (2023)

Congreso

The protonation state of an active site lysine governs the thermodynamics of FAD reduction by NADPH in glutathione reductase: Insights from molecular modeling

Argentina

Tipo de participación: Poster

Carga horaria: 30

Nombre de la institución promotora: Sociedad Argentina de Biofísica

Alcance geográfico: Regional Palabras Clave: Catálisis enzimática QM/MM Flavoproteínas

Áreas de conocimiento:

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

Electroquímica / Bioquímica computacional

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

9th Symposium on Theoretical Biophysics (TheoBio2023) (2023)

Simposio

The effect of protonation state of an active site lysine on FAD reduction by NADPH in glutathione reductases.

Italia

Tipo de participación: Poster

Carga horaria: 40

Nombre de la institución promotora: Università della Calabria

Alcance geográfico: Internacional Áreas de conocimiento:

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

Electroquímica / Química Teórica y Computacional

VII Simposio CEINBIO (2022)

Simposio

Rol del residuo Lys66 en la reducción de FAD por NADPH en glutatión reductasa humana

Uruguay

Tipo de participación: Poster

Carga horaria: 4

LatinXChem Twitter Conference 2021 (2021)

Congreso

The catalytic mechanism of ethanolamine ammonia lyase: A QM/MM study

México

Tipo de participación: Poster

Carga horaria: 2

Nombre de la institución promotora: LatinXChem Palabras Clave: QM/MM Catálisis radical B12

Areas de conocimiento:

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

Electroquímica / Química Teórica y Computacional

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

Séptimo Encuentro Nacional de Química (2021)

Encuentro

Rol del residuo Lys207 en el ciclo catalítico de la sulfuro:quinona oxidorreductasa humana

Uruguay

Tipo de participación: Poster

Carga horaria: 2

Nombre de la institución promotora: PEDECIBA Química y Facultad de Química, UdelaR Palabras

Clave: DFT Flavoproteínas

Areas de conocimiento:

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

Electroquímica / Química Teórica y Computacional

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

LatinXChem Twitter Conference 2020 (2020)

Congreso

Trisulfide vs. Disulfide Reactivity in Human Sulfide:Quinone Oxidoreductase

México

Tipo de participación: Poster

Carga horaria: 4

Nombre de la institución promotora: LatinXChem Areas de conocimiento:

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

Electroquímica / Química Teórica y Computacional

Congreso Virtual

II Congreso Nacional de Biociencias (2019)

Congreso

Elucidación in silico del mecanismo de la oxidación de ácidos sulfénicos por peróxidos hacia su relevancia biológica

Uruguay

Tipo de participación: Poster

Carga horaria: 16

Nombre de la institución promotora: Sociedad Uruguaya de Biociencias Areas de conocimiento:

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

Electroquímica / Química Teórica y Computacional

Thiols: key players in the redox regulation of cellular functions (2019)

Simposio

Computational modeling of the mechanism of oxidation of H₂S by FAD in sulfide:quinone oxidoreductases

Uruguay

Tipo de participación: Poster

Carga horaria: 20

Nombre de la institución promotora: Universidad de la República e Institut Pasteur de Montevideo

Palabras Clave: Tioles biológicos biología redox

Areas de conocimiento:

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

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

Electroquímica / Bioquímica computacional

XLIV Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina (2018)

Congreso

Understanding the mechanism of H₂S oxidation by FAD-dependent sulfide oxidases: A DFT study
Chile

Tipo de participación: Expositor oral

Carga horaria: 40

Nombre de la institución promotora: Pontificia Universidad Católica de Chile Palabras Clave:
Modelado computacional DFT QM/MM

Áreas de conocimiento:

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

XLII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina (2016)

Congreso

Comparison between Additive and Subtractive QM/MM Schemes on the Reaction of Cys34
Sulfenate of HSA with H₂O₂

Uruguay

Tipo de participación: Expositor oral

Carga horaria: 40

Nombre de la institución promotora: Universidad de la República Palabras Clave: QM/MM
Proteínas Oxidación de tioles Embedding

Áreas de conocimiento:

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

10th Congress on Electronic Structure: Principles and Applications (2016)

Congreso

QM/MM (ONIOM) study of the reaction catalyzed by ethanolamine ammonia lyase

España

Tipo de participación: Poster

Carga horaria: 30

Nombre de la institución promotora: Universitat Jaume I Palabras Clave: DFT QM/MM Estructura
electrónica

Áreas de conocimiento:

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

Thiol Metabolism and Redox Regulation of Cellular Functions (2015)

Simposio

Effects of glycation of human serum albumin on the properties of its free thiol: A computational
study

Uruguay

Tipo de participación: Poster

Carga horaria: 16

Nombre de la institución promotora: International Centre for Genetic Engineering and
Biotechnology Palabras Clave: Tioles Dinámica molecular Glicación Albúmina sérica

Áreas de conocimiento:

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

Latin American Crosstalk in Biophysics and Physiology (2015)

Congreso

Latin American Crosstalk in Biophysics and Physiology

Uruguay

Tipo de participación: Poster

Carga horaria: 36

Nombre de la institución promotora: Latin American Federation of Biophysical Societies Palabras
Clave: Proteínas de membrana Simulaciones moleculares Lípidos de membrana Interacciones
lípid-proteína

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica

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

10th Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists (2014)

Congreso

Modeling the reaction mechanism of sulfenic acid oxidation by hydrogen peroxide

Chile

Tipo de participación: Poster

Carga horaria: 20

Nombre de la institución promotora: World Association of Theoretical and Computational Chemists Palabras Clave: DFT Modelado computacional Especies reactivas del oxígeno Ácidos sulfénicos Oxidación de tioles

Areas de conocimiento:

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

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

VIII Meeting of the Society Free Radical Biology and Medicine-South American Group (2013)

Congreso

Human serum albumin thiol protonation state and oxidation by hydrogen peroxide: A mixed experimental and computational approach

Argentina

Tipo de participación: Poster

Nombre de la institución promotora: Society Free Radical Biology and Medicine-South American Group Palabras Clave: Albúmina Tioles biológicos Biología redox

Areas de conocimiento:

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

3er Encuentro Nacional de Ciencias Químicas (2013)

Congreso

Sobreoxidación de tioles biológicos: Estudio computacional de la reacción de sulfenato (RSO-) con H₂O₂

Uruguay

Tipo de participación: Poster

Nombre de la institución promotora: PEDECIBA Química Palabras Clave: Redox Tioles biológicos

Areas de conocimiento:

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

2as Jornadas de +Biofísica (2013)

Congreso

Elucidación del mecanismo de sobreoxidación de la albúmina sérica humana por H₂O₂ por modelado computacional y FT-IR

Uruguay

Tipo de participación: Poster

Nombre de la institución promotora: Sociedad Uruguaya de Biofísica Palabras Clave: Albúmina Redox Tioles biológicos

Areas de conocimiento:

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

1as Jornadas de +Biofísica (2012)

Congreso

Modelado computacional de la reacción del tiol libre de la albúmina sérica humana con H₂O₂

Uruguay

Tipo de participación: Expositor oral

Nombre de la institución promotora: Sociedad Uruguaya de Biofísica Palabras Clave: Albúmina QM/MM Tioles biológicos

Areas de conocimiento:

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

XIV Jornadas de la SUB (2012)

Congreso

Modelado computacional y estudio experimental de propiedades del tiol de la albúmina sérica humana
 Uruguay
 Tipo de participación: Poster
 Carga horaria: 36 Palabras Clave: Albúmina QM/MM Tioles Redox
 Areas de conocimiento:
 Ciencias Médicas y de la Salud / Medicina Básica / Bioquímica y Biología Molecular

2º Encuentro Nacional de Ciencias Químicas (2011)

Congreso
 Estudio comparado de la interacción ligando-proteína entre complejos $[Re(V)O_2L_2]+1$ (L = diamina alifática) y albúmina sérica de origen bovino y humano
 Uruguay
 Tipo de participación: Poster
 Nombre de la institución promotora: PEDECIBA Química Palabras Clave: DFT Albúmina Docking molecular
 Areas de conocimiento:
 Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional

Seminario del IQB (2010)

Seminario
 Modelado de la formación de radicales del sustrato en el sitio activo de la etanolamina amonio liasa
 Uruguay
 Tipo de participación: Expositor oral
 Carga horaria: 3
 Nombre de la institución promotora: Instituto de Química Biológica, Facultad de Ciencias, Universidad de la República Palabras Clave: Catálisis radical DFT Abstracción de hidrógeno
 Areas de conocimiento:
 Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional

Información adicional

Investigador Nivel 3 del PEDECIBA Química

Indicadores de producción

ACTIVIDADES	40
Líneas de investigación	1
Proyectos Investigación Desarrollo	4
Docencia	15
Extensión	10
Gestión Académica	3
Pasantía	7
PRODUCCIÓN BIBLIOGRÁFICA	8
Artículos publicados en revistas científicas	8
Completo	8
EVALUACIONES	1
Evaluación de publicaciones	1
	1

FORMACIÓN RRHH	
Tutorías/Orientaciones/Supervisiones concluidas	1
Tesis/Monografía de grado	1