



JENNER NATHANIEL  
BONANATA SILVA

Doctor

[jbonanata@fcien.edu.uy](mailto:jbonanata@fcien.edu.uy)

Avenida 8 de octubre 3435  
bis apartamento 805  
099126160

### SNI

Ciencias Naturales y Exactas /  
Ciencias Químicas  
Categorización actual: Iniciación (Activo)

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

## Datos Generales

### INSTITUCIÓN PRINCIPAL

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

### DIRECCIÓN INSTITUCIONAL

Institución: Universidad de la República / Facultad de Ciencias - UDeLaR / Sector Educación Superior/Público

Dirección: Iguá 4225 / 11400 / Montevideo , Montevideo , Uruguay

Teléfono: (598) 25258618

Correo electrónico/Sitio Web: [jbonanata@fcien.edu.uy](mailto:jbonanata@fcien.edu.uy) <http://www.lqtc.fcien.edu.uy>

## Formación

### Formación académica

#### CONCLUIDA

##### DOCTORADO

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

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

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

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

Obtención del título: 2017

Institución financiadora: 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 - UDeLaR , Uruguay

Título de la disertación/tesis: 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: <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

Areas de conocimiento:

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

## **PARTICIPACIÓN EN EVENTOS**

### **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

Areas 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

Areas 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

Areas 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

Areas 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

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)**

Tipo: Congreso

Institución organizadora: Sociedad Uruguaya de Biofísica, Uruguay

Palabras Clave: Biofísica

Areas 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 MÉDICAS Y DE LA SALUD

Medicina Básica /Bioquímica y Biología Molecular /Enzimología

## CIENCIAS NATURALES Y EXACTAS

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

## Actuación profesional

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

Facultad de Ciencias - UDeLaR / Laboratorio de Química Teórica y Computacional - Instituto de Química Biológica

### VÍNCULOS CON LA INSTITUCIÓN

#### Funcionario/Empleado (05/2018 - a la fecha)

Asistente ,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 - a la fecha)

Ayudante de Química Teórica y Computacional (en apartamiento de carrera desde mayo de 2018)  
,20 horas semanales  
Apartamiento de carrera desde mayo de 2018.  
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**

**PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN Y DESARROLLO**

**Sulfuro-quinona oxidorreductasa: Buscando las causas de la extraordinaria aceleración de una reacción química (03/2017 - a la fecha)**

Aunque el sulfuro de hidrógeno (H<sub>2</sub>S) 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 H<sub>2</sub>S 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 H<sub>2</sub>S, el transporte de azufre y en la catálisis enzimática. En mamíferos, la oxidación del H<sub>2</sub>S se da fundamentalmente en la mitocondria, y el primer paso de ésta está catalizado por la sulfuro-quinona oxidorreductasa (SQR), enzima que cataliza la oxidación del H<sub>2</sub>S 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, H<sub>2</sub>S o sulfito, para producir glutatión persulfuro, H<sub>2</sub>S<sub>2</sub> o tiosulfato. Los mecanismos de las diferentes SQR tienen la misma primera etapa, el ataque nucleofílico del H<sub>2</sub>S, más precisamente SH<sup>-</sup>, 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 H<sub>2</sub>S 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

En Marcha

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

Areas 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 ("Fisicoquímica 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 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 - UDeLaR, Uruguay, Apoyo financiero

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

Palabras clave: Albúmina Tioles biológicos Glicación Estrés oxidativo

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,  
Electroquímica / Fisicoquímica 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 ("Fisicoquímica 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 - UDeLaR, Uruguay, Apoyo financiero

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

Palabras clave: Albúmina Tioles Redox

Áreas de conocimiento:

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

## **DOCENCIA**

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

Grado

Asistente

Asignaturas:

Fisicoquímica Moderna, 11 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:

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

Áreas 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 - 12/2016)**

Doctorado

Asistente

Asignaturas:

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

Áreas 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

Áreas 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

Áreas de conocimiento:

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

Electroquímica / Química Teórica y Computacional

### **EXTENSIÓN**

#### **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

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

Universidad Autónoma de Barcelona

#### **VÍNCULOS CON LA INSTITUCIÓN**

##### **Otro (05/2016 - 06/2016)**

Pasante de investigación, 30 horas semanales

Capacitación en modelado QM/MM con ChemShell

#### **ACTIVIDADES**

##### **PASANTÍAS**

##### **(05/2016 - 06/2016)**

Departament de Química, Dinàmica i mecanismes de les reaccions químiques i bioquímiques

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 - ARGENTINA**

Universidad de Buenos Aires

#### **VÍNCULOS CON LA INSTITUCIÓN**

##### **Otro (09/2015 - 10/2015)**

Pasante de investigación, 30 horas semanales

Capacitación en simulaciones de dinámica molecular QM/MM con LIO/AMBER

#### **ACTIVIDADES**

##### **PASANTÍAS**

##### **(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

### CARGA HORARIA

Carga horaria de docencia: 10 horas

Carga horaria de investigación: 30 horas

Carga horaria de formación RRHH: Sin horas

Carga horaria de extensión: Sin horas

Carga horaria de gestión: Sin horas

## Producción científica/tecnológica

Comencé a realizar actividades de investigación en el Laboratorio de Química Teórica y Computacional (LQTC) del Instituto de Química Biológica (IQB) de la Facultad de Ciencias en el año 2009, donde realicé una pasantía de grado que consistió en el modelado computacional DFT de propiedades de una serie de dioxocomplejos de renio(V) con potencial valor radiofarmacéutico. Luego, realicé mi Tesis de Grado en el LQTC trabajando en el modelado DFT del mecanismo de la abstracción de hidrógeno de la etanolamina por el radical 5'-desoxiadenosilo, como modelo de la primera etapa de la reacción catalizada por la etanolamina amonio liasa (EAL). Como tema de Tesis de Doctorado (la cual se defenderá el presente año), y también en el marco de un proyecto CSIC, desde 2011 estoy trabajando en el estudio de propiedades del tiol de la albúmina sérica humana (HSA) y de su derivado, el ácido sulfénico, y de la interacción entre la oxidación del tiol y la glicación de la HSA. En este trabajo, en el cual se utilizó un enfoque mixto experimental-computacional, se emplearon una serie de técnicas experimentales (espectroscopía infrarroja, cinética química, cromatografía líquida de alta performance) y de modelado computacional (modelado DFT, dinámica molecular, QM/MM). Por otro lado, en paralelo estoy trabajando en el modelado QM/MM de la reacción catalizada por la EAL.

En marzo de 2017, en el marco de un proyecto ANII-FCE, comencé a trabajar en el modelado QM/MM de la oxidación del sulfuro de hidrógeno catalizada por la sulfuro:quinona oxidoreductasa (SQR). La primera etapa de la reacción catalizada por la SQR consiste en el ataque nucleofílico del anión hidrosulfuro sobre un disulfuro ubicado en el sitio activo, el cual es un proceso lento en sistemas de bajo peso molecular (cistina) pero en el sitio activo de la SQR es de 5 a 7 órdenes de magnitud más rápida. El modelado computacional de dicha reacción buscará explicar a qué se debe tan extraordinaria aceleración.

## Producción bibliográfica

### ARTÍCULOS PUBLICADOS

#### ARBITRADOS

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

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

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>

Scopus® WEB OF SCIENCE®

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

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  
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>  
Scopus® WEB OF SCIENCE™

#### **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  
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>  
Scopus® WEB OF SCIENCE™

#### **PUBLICACIÓN DE TRABAJOS PRESENTADOS EN EVENTOS**

##### **Sulfenic acid or sulfenate? A matter of protein environment and water access in oxidized cysteine sites of physiological relevance (2017)**

Resumen  
E. L. COITIÑO , BONANATA, J. , PORTILLO-LEDESMA, S.

Evento: Internacional  
Descripción: 11th Triennial Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists  
Ciudad: Munich, Alemania  
Año del evento: 2017  
Palabras clave: QM/MM Proteínas Ácido Sulfénico TioI  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,  
Electroquímica / Química Teórica y Computacional  
Medio de divulgación: Internet

##### **Local environments modulating cysteine pKa and reactivity towards oxidation by hydrogen peroxide (2017)**

Resumen  
E. L. COITIÑO , PORTILLO-LEDESMA, S. , BONANATA, J.

Evento: Internacional  
Descripción: XLIII Congrès des Chimistes Théoriciens d'Expression Latine  
Ciudad: París, Francia  
Año del evento: 2017  
Palabras clave: QM/MM Proteínas Redox TioI Microentorno  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,  
Electroquímica / Química Teórica y Computacional  
Medio de divulgación: Internet

##### **QM/MM (ONIOM) study of the reaction catalyzed by ethanolamine ammonia lyase (2016)**

Resumen  
BONANATA, J., COITIÑO, E. L.

Evento: Internacional  
Descripción: 10th Congress on Electronic Structure: Principles and Applications  
Ciudad: Castellón de la Plana, España  
Año del evento: 2016  
Palabras clave: DFT QM/MM  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,  
Electroquímica / Química Teórica y Computacional  
Medio de divulgación: Papel

**Protein Sulfenic Derivatives in a Redox Crossroad: Mechanistic Insights from Representative Models of Oxidation by H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> and Reduction by Ascorbate (2015)**

Resumen  
BONANATA, J., PORTILLO-LEDESMA, S., ÁLVAREZ, B., COITIÑO, E. L.

Evento: Internacional  
Descripción: Thiol Metabolism and Redox Regulation of Cellular Functions  
Ciudad: Montevideo  
Año del evento: 2015  
Palabras clave: QM/MM Tioles Redox Oxidación de tioles Química cuántica  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,  
Electroquímica / Físicoquímica biológica  
Medio de divulgación: Internet

**Effects of Cys34 S-cysteinylation on the tendency to glycate of Arg/Lys residues in human serum albumin (2015)**

Resumen  
BONANATA, J., ÁLVAREZ, B., COITIÑO, E. L.

Evento: Internacional  
Descripción: Latin American Crosstalk in Biophysics and Physiology  
Ciudad: Salto, Uruguay  
Año del evento: 2015  
Palabras clave: QM/MM Dinámica molecular Simulaciones moleculares  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,  
Electroquímica / Química Teórica y Computacional  
Medio de divulgación: Papel  
<http://masbiofisica.fcien.edu.uy/>

**In silico approach to Human Serum Albumin (HSA) early glycation mechanism (2015)**

Resumen  
ORTIZ, F., BONANATA, J., COITIÑO, E. L.

Evento: Internacional  
Descripción: Latin American Crosstalk in Biophysics and Physiology  
Ciudad: Salto, Uruguay  
Año del evento: 2015  
Palabras clave: DFT QM/MM Dinámica molecular  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,  
Electroquímica / Química Teórica y Computacional  
Medio de divulgación: Papel  
<http://masbiofisica.fcien.edu.uy/>

**Effects of glycation of human serum albumin on the properties of its free thiol: A computational study (2015)**

Resumen  
BONANATA, J., ÁLVAREZ, B., COITIÑO, E. L.

Evento: Internacional  
Descripción: Thiol Metabolism and Redox Regulation of Cellular Functions  
Ciudad: Montevideo

Año del evento: 2015

Palabras clave: Tioles Dinámica molecular Glicación Albúmina sérica

Areas de conocimiento:

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

Electroquímica / Físicoquímica biológica

Medio de divulgación: Internet

**Optimizing an HPLC chromatofocusing procedure for the analysis of oxidized human serum albumin (2015)**

Resumen

DEAMBROSI, M. , BONANATA, J. , ÁLVAREZ, B.

Evento: Internacional

Descripción: Thiol Metabolism and Redox Regulation of Cellular Functions

Ciudad: Montevideo

Año del evento: 2015

Palabras clave: Oxidación de tioles Albúmina sérica Cromatografía

Areas de conocimiento:

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

Electroquímica / Físicoquímica biológica

Medio de divulgación: Internet

**Aportando piezas clave para entender el mecanismo de apertura de la glucopiranososa en seroalbúmina humana (2014)**

Resumen

ORTIZ, F. , BONANATA, J. , COITIÑO, E. L.

Evento: Nacional

Descripción: XV Jornadas de la Sociedad Uruguaya de Biociencias

Ciudad: Piriápolis

Año del evento: 2014

Palabras clave: DFT Modelado computacional Glicación de Proteínas Catálisis

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 Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,  
Electroquímica / Físicoquímica biológica

**Profundizando en el conocimiento del mecanismo de la reacción de Michael entre nitroalquenos del ácido oleico y tioles (2014)**

Resumen

PÉREZ-ESCANDA, D. , SAGASTI, C. , BONANATA, J. , COITIÑO, E. L.

Evento: Nacional

Descripción: XV Jornadas de la Sociedad Uruguaya de Biociencias

Ciudad: Piriápolis

Año del evento: 2014

Palabras clave: DFT Tioles Nitroalquenos Electrófilos

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

Medio de divulgación: Papel

**Modeling the reaction mechanism of sulfenic acid oxidation by hydrogen peroxide (2014)**

Resumen

BONANATA, J. , ÁLVAREZ, B. , COITIÑO, E. L.

Evento: Internacional

Descripción: 10th Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists

Ciudad: Santiago de Chile

Año del evento: 2014

Palabras clave: DFT 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 / Química Teórica y Computacional

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

**Human serum albumin thiol protonation state and oxidation by hydrogen peroxide: A mixed experimental and computational approach (2013)**

Resumen

BONANATA, J. , ÁLVAREZ, B. , COITIÑO, L.

Evento: Internacional

Descripción: VIII Meeting of the Society Free Radical Biology and Medicine-South American Group

Ciudad: Buenos Aires

Año del evento: 2013

Palabras clave: Albúmina Redox Tioles biológicos

Areas de conocimiento:

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

Electroquímica / Físicoquímica biológica

Medio de divulgación: Papel

**Sobreoxidación de tioles biológicos: Estudio computacional de la reacción de sulfenato (RSO-) con H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> (2013)**

Resumen

BONANATA, J. , ÁLVAREZ, B. , COITIÑO, L.

Evento: Nacional

Descripción: 3er Encuentro Nacional de Ciencias Químicas

Ciudad: Montevideo

Año del evento: 2013

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

Medio de divulgación: Internet

**Elucidación del mecanismo de sobreoxidación de la albúmina sérica humana por H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> por modelado computacional y FT-IR (2013)**

Resumen

BONANATA, J. , ÁLVAREZ, B. , COITIÑO, L.

Evento: Nacional

Descripción: 2as Jornadas de +Biofísica

Ciudad: Montevideo

Año del evento: 2013

Palabras clave: Albúmina Redox Tioles biológicos

Areas de conocimiento:

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

Electroquímica / Físicoquímica biológica

Medio de divulgación: Papel

**Modelado computacional y estudio experimental de propiedades del tiol de la albúmina sérica humana (2012)**

Resumen

BONANATA, J. , MÉNDEZ, E. , ÁLVAREZ, B. , COITIÑO, E. L.

Evento: Nacional

Descripción: XIV Jornadas de la SUB

Ciudad: Piriápolis

Año del evento: 2012

Palabras clave: Albúmina QM/MM Tioles Redox FT-IR

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

**Modelado computacional de la reacción del tiol libre de la albúmina sérica humana con H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> (2012)**

Resumen

BONANATA, J. , ÁLVAREZ, B. , COITIÑO, E. L.

Evento: Nacional  
Descripción: 1as Jornadas de +Biofísica  
Ciudad: Montevideo  
Año del evento: 2012  
Palabras clave: Albúmina QM/MM Redox Tioles biológicos  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,  
Electroquímica / Química Teórica y Computacional  
Medio de divulgación: Internet

**Estudio comparado de la interacción ligando-proteína entre complejos [Re(V)O<sub>2</sub>L<sub>2</sub>]<sup>+</sup>1 (L = diamina alifática) y albúmina sérica de origen bovino y humano (2011)**

Resumen  
BONANATA, J., MERLINO, A., CERDÁ, M. F., COITIÑO, E. L.

Evento: Nacional  
Descripción: Segundo Encuentro Nacional de Ciencias Químicas  
Ciudad: Montevideo  
Año del evento: 2011  
Palabras clave: Albúmina Docking Modelado por homología Radiofarmacéuticos  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,  
Electroquímica / Química Teórica y Computacional  
Medio de divulgación: Papel

**Assessing the Nature of the Protein H-bond Network on Substrates Transformation at the Active Site of EAL-B12 (2011)**

Resumen  
BONANATA, J., COITIÑO, E. L.

Evento: Internacional  
Descripción: 5th Theoretical Biophysics International Symposium (TheoBio 2011)  
Ciudad: Madeira, Portugal  
Año del evento: 2011  
Palabras clave: Catálisis radical Liasas Enlace de hidrógeno QM/MM  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,  
Electroquímica / Química Computacional  
Medio de divulgación: Papel

**Increasing Complexity Models for Describing the Generation of Substrate Radicals at the Active Site of Ethanolamine Ammonia Lyase/B12 (2010)**

Resumen  
COITIÑO, E. L., BONANATA, J., SIGNORELLI, S.

Evento: Internacional  
Descripción: 7th Congress on Electronic Structure: Principles and Applications  
Ciudad: Oviedo, España  
Año del evento: 2010  
Palabras clave: Catálisis radical Abstracción de hidrógeno Liasas Coenzima B12  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,  
Electroquímica / Química Computacional  
Medio de divulgación: Papel

**In silico characterization of the interaction of a series of [ReO<sub>2</sub>L<sub>2</sub>]<sup>+</sup> complexes with serum albumin (2010)**

Resumen  
BONANATA, J., MERLINO, A., CERDÁ, M. F., COITIÑO, E. L.

Evento: Internacional  
Descripción: 1st International Conference on Bioinformatics SolBio 2010  
Ciudad: Chillán, Chile  
Año del evento: 2010  
Palabras clave: Albúmina Complejos de coordinación Bioinorgánica  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica / Química Computacional  
Medio de divulgación: Papel

**Fomentando la metacognición y el desarrollo de pensamiento autónomo y crítico desde ambientes de aprendizaje cooperativo/colaborativo en Físicoquímica Moderna (2010)**

Resumen  
COITIÑO, E. L., BONANATA, J., MERLINO, A., MININI, L., PITTINI, A., PORTILLO, S.

Evento: Nacional  
Descripción: Foro de Innovaciones en Educación Superior  
Ciudad: Montevideo, Uruguay  
Año del evento: 2010  
Palabras clave: Metacognición Trabajo cooperativo  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Sociales / Ciencias de la Educación / Educación General / Educación superior  
Medio de divulgación: Papel

## 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 (2016)**

Tesis/Monografía de grado  
Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Ciencias - UDeLaR, Uruguay  
Programa: Licenciatura en Bioquímica  
Tipo de orientación: Asesor/Orientador  
Nombre del orientado: Federico Ortiz  
Medio de divulgación: Papel  
País/Idioma: Uruguay, Español  
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

**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 H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>  
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 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)**

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

Áreas 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

Áreas 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



H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>

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 H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> 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 H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>

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<sub>2</sub>L<sub>2</sub>]<sup>+1</sup> (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

Áreas de conocimiento:

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

## Indicadores de producción

<b>PRODUCCIÓN BIBLIOGRÁFICA</b>	<b>24</b>
<b>Artículos publicados en revistas científicas</b>	3
Completo	3
<b>Trabajos en eventos</b>	21
<b>FORMACIÓN RRHH</b>	<b>1</b>
<b>Tutorías/Orientaciones/Supervisiones concluidas</b>	1
Tesis/Monografía de grado	1