



**MATÍAS RODRIGO
MACHADO GONZALEZ**

PhD

mmachado@pasteur.edu.uy
www.sirahff.com

SNI

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

Fecha de publicación: 05/10/2018
Última actualización SNI: 05/10/2018

Datos Generales

INSTITUCIÓN PRINCIPAL

Institut Pasteur de Montevideo/ Institut Pasteur de Montevideo / Grupo de Simulaciones Biomoleculares / Uruguay

DIRECCIÓN INSTITUCIONAL

Institución: Institut Pasteur de Montevideo / Institut Pasteur de Montevideo / Sector Organizaciones Privadas sin Fines de Lucro/Sociedades Científico-Tecnológicas
Dirección: Mataojo 2020 / 11400 / Montevideo, Montevideo, Uruguay
Teléfono: (02) 5220910 / 157
Correo electrónico/Sitio Web: mmachado@pasteur.edu.uy www.pasteur.edu.uy

Formación

Formación académica

CONCLUIDA

DOCTORADO

Doctorado en Ciencias Biológicas (UDELAR-PEDECIBA) (2008 - 2012)

Universidad de la República - Facultad de Ciencias - UDeLaR, Uruguay
Título de la disertación/tesis: Modelado Molecular de Procesos Relacionados a la Transcripción del virus VIH-1
Tutor/es: Sergio Pantano
Obtención del título: 2012
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Modelado Molecular

GRADO

Licenciatura en Bioquímica (2001 - 2007)

Universidad de la República - Facultad de Ciencias - UDeLaR, Uruguay
Título de la disertación/tesis: Monografía: Células Dendríticas Origen, Subtipos y Función- Trabajo experimental: Caracterización de antígenos de Echinococcus granulosus mediante una visión integrada de varios enfoques
Tutor/es: Dras. Sylvia Dematteis y Verónica Fernández
Obtención del título: 2007
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular / Inmunología

EN MARCHA

MAESTRÍA

Maestría en Bioinformática (2009)

Universidad de la República, Facultad de Ciencias - UDeLaR, Uruguay
Título de la disertación/tesis:
Tutor/es: Sergio Pantano
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática /

GRADO

Licenciatura en Ciencias Biológicas (2001)

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

Título de la disertación/tesis:

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biología Marina, Limnología /

Formación complementaria

CONCLUIDA

CURSOS DE CORTA DURACIÓN

Bioinformática estructural e análisis do proteoma (01/2013 - 01/2013)

Sector Extranjero/Internacional/Otros / Escola Brasileiro -Argentina de Biotecnología , Brasil
80 horas

Palabras Clave: Bioinformática Proteómica

Áreas de conocimiento:

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

Course Molecular Biology of Viral Diseases (01/2011 - 01/2011)

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

50 horas

Áreas de conocimiento:

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

Coarse-Grained Biomolecular Modeling (01/2011 - 01/2011)

Sector Extranjero/Internacional/Enseñanza superior / Ecole Polytechnique Federale de Lausanne , Suiza

40 horas

Palabras Clave: Modelado molecular

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Modelado y Simulaciones Moleculares

Coarse-grained Simulation of Biological Soft Matter Systems using ESPResSo (01/2011 - 01/2011)

Sector Extranjero/Internacional/Otros / Universität Stuttgart , Alemania

40 horas

Palabras Clave: Modelado molecular

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Modelado y Simulaciones Moleculares

Latin American Postgraduate Program of Biophysics (01/2009 - 01/2009)

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

32 horas

Palabras Clave: Biofísica general

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica /

Introducción a la programación de aplicaciones bioinformáticas en Bash (01/2007 - 01/2007)

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

Áreas de conocimiento:

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

Evaluación en el aula universitaria: diseño de instrumentos (01/2006 - 01/2006)

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

Uruguay

Introducción a la Docencia Universitaria-Programa de Formación Docente (01/2005 - 01/2005)

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

Química de la Atmósfera y Polución (UdEP) (01/2003 - 01/2003)

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

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Tierra y relacionadas con el Medio Ambiente /
Meteorología y Ciencias Atmosféricas / Química Atmosférica

PARTICIPACIÓN EN EVENTOS

Curso: Creación y Gestión de Empresas (2010)

Tipo: Otro

Institución organizadora: Camara Nacional de Comercio y Servicios del Uruguay, Uruguay

Palabras Clave: Emprendedurismo Empresa

Áreas de conocimiento:

Ciencias Sociales / Economía y Negocios / Negocios y Administración /

Conference on Modeling and Computation of Structure and Dynamics of Condensed Phase Systems (2008)

Tipo: Congreso

Institución organizadora: Scuola Internazionale Superiore di Studi Avanzati di Trieste (SISSA), Italia

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Modelado y
Simulaciones Moleculares

Pasantía de siete meses en el área Pure and applied chemistry del International Centre for Science and High Technology (2008)

Tipo: Otro

Institución organizadora: International Centre for Science and High Technology-UNIDO (ICS-
UNIDO), Italia

Áreas de conocimiento:

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

Advanced School in High Performance and GRID Computing (2008)

Tipo: Taller

Institución organizadora: International Centre for Theoretical Physics (ICTP), Italia

Áreas de conocimiento:

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

Pasantía experimental "Exploring the Interaction between HP1-Suv39" (2008)

Tipo: Otro

Institución organizadora: International Centre for Genetic Engineering and Biotechnology
(ICGEB), Italia

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Modelado y Simulaciones
Moleculares

Conference on Knots and other Entanglements in Biopolymers: Topological and Geometrical Aspects of DNA, RNA and Protein Structures (2008)

Tipo: Congreso

Institución organizadora: International Centre for Theoretical Physics (ICTP), Italia

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Estructura de Macromoléculas

Training Course: Molecular Design and Computer-assisted Combinatorial Chemistry (2008)

Tipo: Seminario

Institución organizadora: International Centre for Science and High Technology-UNIDO (ICS-UNIDO), Italia

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Diseño "in silico" de Farmacos

Eighth Giambiagi Winter School-Part A (2006)

Tipo: Simposio

Institución organizadora: Universidad de Buenos Aires, Argentina

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Modelado Molecular y Química Teórica

Estudio de reacciones radicalarias, catalizadas por el cofactor vitamina B12 dentro del sitio activo de la Etanolamina amonio liasa (2003)

Tipo: Otro

Institución organizadora: LQTC - IQB - Facultad de Ciencias 2003 al 2008, Uruguay

Pasantía honoraria "Análisis de los efectos del entorno sobre el mecanismo de la reacción de transformación de etanolamina en acetaldehído y amoníaco en condiciones de protonación parcial y total" (2003)

Tipo: Otro

Institución organizadora: LQTC - IQB - Facultad de Ciencias, Uruguay

Idiomas

Español

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

Inglés

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

Áreas de actuación

CIENCIAS NATURALES Y EXACTAS

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

CIENCIAS NATURALES Y EXACTAS

Ciencias Biológicas / Biofísica / Modelado y Simulaciones Moleculares

Actuación profesional

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

Institut Pasteur de Montevideo

VÍNCULOS CON LA INSTITUCIÓN

Funcionario/Empleado (09/2014 - a la fecha)

Postdoctorando, 40 horas semanales
Laboratorio de Biosimulaciones

Funcionario/Empleado (02/2008 - 09/2014)

Investigador Asistente, 40 horas semanales
Grupo de Simulaciones Biomoleculares.

ACTIVIDADES

LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN

Desarrollo y aplicación de modelos de grano grueso para la simulación de sistemas biológicos (02/2010 - a la fecha)

Mixta

40 horas semanales

Laboratorio de Biosimulaciones, Laboratorio de Biosimulaciones , Integrante del equipo

Equipo: S. PANTANO

Palabras clave: SIRAH force field

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Modelado y Simulaciones Moleculares

Dissecting the repression/activation of HIV-1 transcription: Study of the intrinsic flexibility of HP1 proteins (02/2008 - 10/2012)

40 horas semanales

Institut Pasteur de Montevideo, Grupo de Simulaciones Biomoleculares , Integrante del equipo

Equipo: S. PANTANO

Palabras clave: simulaciones modelización docking

Áreas de conocimiento:

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

PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN Y DESARROLLO

Use and improvement of the SIRAH force field for Coarse-Grained Simulations applied to intermolecular interactions of proteins (05/2016 - a la fecha)

1 hora semanal

Universidad de Talca (Chile) , Centro de Bioinformática y Simulación Molecular

Investigación

Integrante del Equipo

En Marcha

Financiación:

Comisión Nacional de Investigación Científica y Tecnológica, Chile, Apoyo financiero

Institut Pasteur de Montevideo, Uruguay, Cooperación

Pontificia Universidad Javeriana - Bogotá, Colombia, Cooperación

Pontificia Universidad Católica de Chile, Chile, Cooperación

Equipo: S. PANTANO , J. ALZATE-MORALES (Responsable) , J.M. CABALLERO , D. CÁCERES , F. GONZALEZ , G. OLGUIN , J. GONZALEZ , N.P. BARRERA , D. GONZALEZ-NORAMBUENA , P.L. DE LA TORRE

Palabras clave: SIRAH force field modelos de grano grueso

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Modelado y Simulaciones Moleculares

Caracterización Estructural de Procesos de Transcripción Viral del VIH-1 (06/2009 - 05/2011)

20 horas semanales

Institut Pasteur de Montevideo , Grupo de Simulaciones Biomoleculares

Investigación

Integrante del Equipo

En Marcha

Alumnos encargados en el proyecto:

Maestría/Magister:2

Doctorado:3

Equipo: L. DARRÉ , S. PANTANO (Responsable) , P. DANS , F. HERRERA

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Simulación de Biomoléculas

DOCENCIA

Ingeniería en Bioinformática (Universidad de Talca) (10/2016 - 10/2016)

Especialización

Responsable

Asignaturas:

Introduction to multiscale molecular dynamics simulations, 40 horas, Teórico-Práctico
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Modelado y Simulaciones Moleculares

III CCES Workshop & SAIMS, Universidade Estadual de Campinas (Brasil) (05/2016 - 05/2016)

Especialización
Invitado
Asignaturas:
Molecular dynamics simulations with SIRAH force field, 5 horas, Práctico
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Modelado y Simulaciones Moleculares

Ingeniería en Bioinformática (Universidad de Talca) (11/2015 - 11/2015)

Especialización
Responsable
Asignaturas:
Molecular dynamics simulations with SIRAH force field, 15 horas, Teórico-Práctico
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Modelado y Simulaciones Moleculares

FOCEM (05/2015 - 05/2015)

Especialización
Organizador/Coordinador
Asignaturas:
OpenLab: Performing Molecular Simulations with SIRAH force field, 40 horas, Teórico-Práctico
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Modelado y simulación molecular

FOCEM (11/2013 - 11/2013)

Especialización
Organizador/Coordinador
Asignaturas:
Introduction to Structural Biology and Bioinformatics, 30 horas, Teórico-Práctico
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática /

Ingeniería en Bioinformática (Universidad de Talca) (09/2013 - 09/2013)

Especialización
Invitado
Asignaturas:
International Seminar Germany-Chile: From Plant Biology to Computational Chemistry and Molecular Bioinformatics, 40 horas, Práctico
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática /

AMSUD Pasteur (09/2011 - 10/2011)

Especialización
Organizador/Coordinador
Asignaturas:
Hands-on Course: Coarse Grain Methods for Biomolecular Simulations, 30 horas, Teórico-Práctico
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Modelado y Simulaciones Moleculares

AMSUD Pasteur (02/2010 - 03/2010)

Especialización
Organizador/Coordinador

Asignaturas:

Computational Modelling and Simulations of Biological Systems, 30 horas, Teórico-Práctico

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Modelado Molecular y Química Teórica

EXTENSIÓN

(10/2016 - 10/2016)

8 horas

Áreas de conocimiento:

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

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

(07/2016 - 07/2016)

2 horas

(05/2016 - 05/2016)

10 horas

Áreas de conocimiento:

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

(10/2015 - 10/2015)

8 horas

Áreas de conocimiento:

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

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

(10/2014 - 10/2014)

8 horas

Áreas de conocimiento:

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

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

GESTIÓN ACADÉMICA

Delegado de Ayudantes en Consejo de Investigadores (02/2016 - a la fecha)

Participación en consejos y comisiones

SECTOR EDUCACIÓN SUPERIOR/PÚBLICO - PROGRAMA DE DESARROLLO DE LAS CIENCIAS BÁSICAS - URUGUAY

Programa de Desarrollo de las Ciencias Básicas

VÍNCULOS CON LA INSTITUCIÓN

Otro (03/2014 - a la fecha)

Investigador Grado 3, 40 horas semanales

ACTIVIDADES

DOCENCIA

(08/2014 - 10/2014)

Maestría

Organizador/Coordinador

Asignaturas:

Introducción al análisis estructural y funcional de proteínas, 12 horas, Teórico-Práctico

Áreas de conocimiento:

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

Facultad de Ciencias - UDeLaR

VÍNCULOS CON LA INSTITUCIÓN

Otro (06/2010 - 05/2012)

Claustrista por Orden Egresados ,1 hora semanal
Escalafón: No Docente
Cargo: Interino

Funcionario/Empleado (05/2005 - 05/2008)

Ayudante ,20 horas semanales
Laboratorio de Química Teórica y Computacional del Instituto de Química Biológica.
Escalafón: Docente
Grado: Grado 1
Cargo: Interino

Funcionario/Empleado (07/2004 - 12/2004)

Ayudante ,20 horas semanales
Laboratorio de Química Teórica y Computacional del Instituto de Química Biológica.
Escalafón: Docente
Grado: Grado 1
Cargo: Interino

ACTIVIDADES

LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN

Estudio de reacciones radicalarias catalizadas por el cofactor vitamina B12 dentro del sitio activo de la Etanolamina amonio liasa (06/2003 - 04/2008)

20 horas semanales
Instituto de Química Biológica, Laboratorio de Química Teórica Computacional , Integrante del equipo
Equipo: E. L. COITIÑO
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica Computacional

PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN Y DESARROLLO

Influencia del entorno fisicoquímico sobre la estructura electrónica y reactividad de bases de ADN: hacia el diseño racional de sondas para diagnóstico y fármacos para quimioterapia altamente selectivos de Ru(II) (06/2006 - 04/2008)

25 horas semanales
Instituto de Química Biológica , Laboratorio de Química Teórica Computacional
Investigación
Integrante del Equipo
Concluido
Alumnos encargados en el proyecto:
Pregrado:4
Doctorado:1
Financiación:
Comisión Sectorial de Investigación Científica - UDeLaR, Uruguay, Apoyo financiero
Equipo: L. DARRÉ , G. MOURGLIA , E. L. COITIÑO (Responsable) , A. MERLINO
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica /
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica Computacional

DOCENCIA

Licenciatura en Bioquímica (07/2004 - 12/2007)

Grado

Asignaturas:

Fisicoquímica II Modulo Estructura y Propiedades (Fisicoquímica Moderna Molecular), 6 horas, Teórico-Práctico

Areas de conocimiento:

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

Licenciatura en Bioquímica (03/2005 - 06/2007)

Especialización

Asignaturas:

Curso Taller de Química Computacional, 9 horas, Teórico-Práctico

Areas de conocimiento:

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

CARGA HORARIA

Carga horaria de docencia: Sin horas

Carga horaria de investigación: 35 horas

Carga horaria de formación RRHH: 5 horas

Carga horaria de extensión: Sin horas

Carga horaria de gestión: Sin horas

Producción científica/tecnológica

Mi trabajo se centra en el modelado molecular de procesos biológicos. Como centro de estudio están las proteínas y los ácidos nucleicos. El modelado teórico es actualmente una herramienta muy potente y complementaria al trabajo experimental. El incremento en poder de cálculo ha permitido alcanzar el estudio de procesos en escalas de interés biológico, brindando detalles que de otro modo no podrían ser alcanzados. El objetivo de mi trabajo es el uso e implementación de modelos en simulaciones que permitan aumentar nuestra comprensión sobre el mundo molecular que nos rodea.

Producción bibliográfica

ARTÍCULOS PUBLICADOS

ARBITRADOS

Multiscale modelization in a small virus: Mechanism of proton channeling and its role in triggering capsid disassembly (Completo, 2018)

J. VISO, P. BELELLI, M. MACHADO, H. GONZALEZ, PANTANO S, M.J. AMUNDARAIN, F. ZAMARREÑO, M.M. BRANDA, D.M.A. GUÉRIN, M.D. COSTABEL

PLOS Computational Biology, 2018

Palabras clave: Triatoma Virus SIRAH force field

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Modelado y Simulación Molecular

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Virología /

Medio de divulgación: Otros

ISSN: 1553734X

DOI: [10.1371/journal.pcbi.1006082](https://doi.org/10.1371/journal.pcbi.1006082)

<http://journals.plos.org/ploscompbiol/article?id=10.1371/journal.pcbi.1006082>

Scopus® WEB OF SCIENCE™

FRET biosensor uncovers cAMP nano-domains at beta-adrenergic targets that dictate precise tuning of cardiac contractility (Completo, 2017)

M. BERRERA, N. SURDO, A. KOSCHINSKI, M. BRESCIA, M. MACHADO, C. CARR, S. MOROTTI, E. GRANDI, P. WRIGHT, D. BERS, J. GORELIK, PANTANO S, M. ZACCOLO

Nature Communications, 2017

Palabras clave: Biosensor Fluorescente cAMP

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular /
Medio de divulgación: Internet
ISSN: 20411723
DOI: [10.1038/ncomms15031](https://doi.org/10.1038/ncomms15031)
<http://www.nature.com/ncomms/>
Scopus® WEB OF SCIENCE™

MD Simulations of Virus-Like Particles with Supra CG solvation affordable to desktop computers (Completo, 2017)

M. MACHADO , H. GONZALEZ , PANTANO S
Journal of Chemical Theory and Computation, 2017
Palabras clave: SIRAH force field Virología Simulaciones de biomoléculas
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Modelado y simulación molecular
Medio de divulgación: Otros
ISSN: 15499618
DOI: [10.1021/acs.jctc.7b00659](https://doi.org/10.1021/acs.jctc.7b00659)
<http://pubs.acs.org/journal/jctc>
Scopus® WEB OF SCIENCE™

Regulation of signaling directionality revealed by 3D snapshots of a kinase:regulator complex in action (Completo, 2016)

TRAJTENBERG, F, IMELIO J., M. MACHADO , N. LARRIEUX , M. A. MARTI , OBAL, G., A. E. MECHALY , BUSCHIAZZO, A.
eLife, 2016
Palabras clave: Sistemas dos componentes señalización celular
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biología Celular, Microbiología /
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica /
Medio de divulgación: Internet
ISSN: 2050084X
DOI: [10.7554/eLife.21422](https://doi.org/10.7554/eLife.21422)
<https://elifesciences.org>
Scopus® WEB OF SCIENCE™

SIRAH Tools: mapping, backmapping and visualization of coarse-grained models (Completo, 2016)

M. MACHADO , PANTANO S
Bioinformatics (Oxford, England), v.: 32 p.:1568 - 1570, 2016
Palabras clave: SIRAH force field Toolkit Coarse-grained
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Modelado y simulación molecular
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática /
ISSN: 13674803
DOI: [10.1093/bioinformatics/btw020](https://doi.org/10.1093/bioinformatics/btw020)
<http://bioinformatics.oxfordjournals.org>
M. MACHADO es autor de correspondencia
Scopus® WEB OF SCIENCE™

Application of the DNA-Specific Stain Methyl Green in the Fluorescent Labeling of Embryos (Completo, 2015)

Prieto D, APARICIO, G. , M. MACHADO , ZOLESSI, F. R.
Journal of Visualized Experiments, v.: 99 2015
Palabras clave: Fluorescent Labeling
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Métodos de Investigación en Bioquímica /
Medio de divulgación: Otros
ISSN: 1940087X
DOI: [10.3791/52769](https://doi.org/10.3791/52769)
<http://www.jove.com/>
Scopus® WEB OF SCIENCE™

SIRAH: a structurally unbiased coarse-grained force field for proteins with aqueous solvation and long-range electrostatics (Completo, 2015)

M. MACHADO , DARRÉ L. , AF BRANDNER , H. GONZALEZ , S. FERREIRA , PANTANO S

Journal of Chemical Theory and Computation, v.: 11 p.:723 - 739, 2015

Palabras clave: Coarse-grained methods

Areas de conocimiento:

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

ISSN: 15499618

DOI: [10.1021/ct5007746](https://doi.org/10.1021/ct5007746)

<http://pubs.acs.org/journal/jctcce>

Primer autor compartido con Leonardo Darré

Scopus® WEB OF SCIENCE™

Exploring the Lacl-DNA dynamics by multiscale simulations using the SIRAH force field (Completo, 2015)

M. MACHADO, PANTANO S

Journal of Chemical Theory and Computation, v.: 11 10, p.:5012 - 5023, 2015

Palabras clave: SIRAH force field Proteína represora del operon lac

Areas de conocimiento:

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

ISSN: 15499618

DOI: [10.1021/acs.jctc.5b00575](https://doi.org/10.1021/acs.jctc.5b00575)

<http://pubs.acs.org/journal/jctcce>

M. MACHADO es autor de correspondencia

Scopus® WEB OF SCIENCE™

Assessing the accuracy of the SIRAH force field to model DNA at coarse grain level (Completo, 2013)

PABLO D. DANS, DARRÉ L., M. MACHADO, A. ZEIDA, AF BRANDNER, PANTANO S

Lecture Notes in Computer Science, v.: 8213 p.:71 - 81, 2013

Palabras clave: DNA Molecular Simulation Coarse-grained methods SIRAH force field

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Otros

ISSN: 03029743

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

Scopus® WEB OF SCIENCE™

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

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

Physical Review E, Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics, v.: 86 p.:21903 2012

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Modelado y

Simulaciones Moleculares

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 15393755

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

<http://pre.aps.org/>

Scopus® WEB OF SCIENCE™

Coarse grained models of water (Completo, 2012)

DARRÉ L., M. MACHADO, PANTANO S

WILEY Interdisciplinary Reviews: Computational Molecular Science, v.: 2 p.:921 - 930, 2012

Palabras clave: Coarse-grained methods Modelado molecular Water models

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Modelado y

Simulaciones Moleculares

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 17590884

DOI: [10.1002/wcms.1097](https://doi.org/10.1002/wcms.1097)

<http://wires.wiley.com/WileyCDA/>

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

M. MACHADO, PABLO D. DANS, PANTANO S

Physical Chemistry Chemical Physics, v.: 13 p.:18134 - 18144, 2011

Palabras clave: ADN Simulación molecular Modelos multiescala SIRAH force field

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Simulación de Biomoléculas

ISSN: 14639076
DOI: [10.1039/c1cp21248f](https://doi.org/10.1039/c1cp21248f)
Scopus® WEB OF SCIENCE™

Isoform-specific determinants in the HP1 binding to histone 3: insights from molecular simulations. (Completo, 2010)

M. MACHADO , PABLO D. DANS , PANTANO S
Amino Acids, v.: 5 p.:1571 - 1581, 2010
Palabras clave: Transcription HIV-1 Phosphorylation Epigenetics Methylation
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Estructura de Macromoléculas
Medio de divulgación: Papel
ISSN: 09394451
DOI: [10.1007/s00726-009-0371-3](https://doi.org/10.1007/s00726-009-0371-3)
www.springerlink.com
Scopus® WEB OF SCIENCE™

Another coarse-grain model for aqueous solvation: WAT four? (Completo, 2010)

DARRÉ L. , M. MACHADO , PABLO D. DANS , F. HERRERA , PANTANO S
Journal of Chemical Theory and Computation, v.: 6 p.:3793 - 3807, 2010
Palabras clave: SIRAH force field
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Simulación de Biomoléculas
Medio de divulgación: Papel
ISSN: 15499618
DOI: [10.1021/ct100379f](https://doi.org/10.1021/ct100379f)
<http://pubs.acs.org>
Scopus® WEB OF SCIENCE™

A coarse grained model for atomic-detailed DNA simulations with explicit electrostatics (Completo, 2010)

PABLO D. DANS , A. ZEIDA , M. MACHADO , PANTANO S
Journal of Chemical Theory and Computation, v.: 6 p.:1711 - 1725, 2010
Palabras clave: SIRAH force field
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Acidos Nucleicos
Medio de divulgación: Papel
ISSN: 15499618
DOI: [10.1021/ct900653p](https://doi.org/10.1021/ct900653p)
www.pubs.acs.org
Scopus® WEB OF SCIENCE™

LIBROS

cAMP Signaling (Participación , 2015)

M. MACHADO , PANTANO S
Edición: ,
Editorial: Springer New York, New York
Tipo de publicación: Investigación
DOI: [10.1007/978-1-4939-2537-7_4](https://doi.org/10.1007/978-1-4939-2537-7_4)
Palabras clave: Fluorescent proteinAllosteric mechanismCNBD Rational design Protein engineering
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Métodos de Investigación en Bioquímica /
Medio de divulgación: Internet
ISSN/ISBN: 9781493925377
<http://link.springer.com/book/10.1007%2F978-1-4939-2537-7>
Capítulos:
Structure-Based, In Silico Approaches for the Development of Novel cAMP FRET Reporters
Organizadores:
Página inicial 41, Página final 58

Bioinformática estructural Visualización y diseño asistido por PC de la estructura 3D de moléculas y macromoléculas (Libro publicado Otra , 2007)

E. L. COITIÑO , P. DANS , V. LEONE , A. CASTRO , M. MACHADO , A. SANABRIA
Edición: ,
Editorial: Edición DIRAC - Facultad de Ciencias, Montevideo
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Modelado Molecular
Medio de divulgación: Papel
ISSN/ISBN:

PUBLICACIÓN DE TRABAJOS PRESENTADOS EN EVENTOS

Affordable viral particle's simulations on desktop computers using SIRAH force field (2016)

Resumen
M. MACHADO , J. VISO , M. COSTABEL , S. PANTANO

Evento: Internacional
Descripción: XLV Reunión Anual SAB
Ciudad: Tucuman
Año del evento: 2016
Palabras clave: modelos de grano grueso
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Modelado y Simulaciones
Moleculares
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Virología /
Medio de divulgación: Otros
<http://biofisica.org.ar/reunion2016>

DNA allostery: Atomistic insights into the signal transduction mechanisms (2014)

Resumen
M. MACHADO , S. PANTANO , P. DANS

Evento: Internacional
Descripción: Latin American Summit Meeting on Biological Crystallography and Complementary
Methods
Ciudad: Campinas
Año del evento: 2014
Palabras clave: Coarse-grained methods DNA allostery Molecular dynamics simulation SIRAH
force field
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Modelado y simulación molecular
Medio de divulgación: Otros
<http://pages.cnpem.br/iycr2014-lasummit/>

Integrative modeling of HIV-1 provirus: From knowledge to structure (2013)

Resumen
M. MACHADO , S. PANTANO

Evento: Internacional
Descripción: 30 years of HIV science: Imagine the future
Ciudad: Paris
Año del evento: 2013
Palabras clave: HIV Molecular Modeling Structural Biology
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Modelado y
Simulaciones Moleculares
Medio de divulgación: Otros
<http://www.30yearshiv.org/>

Multiscale simulations: mixing SIRAH and AMBER force fields to explore the LacI-DNA dynamics (2013)

Resumen
M. MACHADO , S. PANTANO

Evento: Regional
Descripción: 4to. Congreso Argentino de Bioinformática y Biología Computacional (4CAB2C) y
4ta. Conferencia Internacional de la Sociedad Iberoamericana de Bioinformática (SolBio)

Ciudad: Rosario, Argentina
Año del evento: 2013
Palabras clave: Lac Operon Multiscale modelling
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Modelado y simulación molecular
Medio de divulgación: Otros
<http://congreso4a2b2c.cifasis-conicet.gov.ar/>

Analysis of a complete genomic sequence of BLV strain obtained from a lymphosarcoma (2011)

Resumen

G. MORATORIO , S. BIANCHI , L. TOME , G. RAMA , G. OBAL , F. CARRION , M. MACHADO , S. PANTANO , J. CRISTINA , O. PRITSCH

Evento: Internacional

Descripción: 15th International Conference on Human Retrovirology, HTLV and related viruses

Año del evento: 2011

Áreas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Otros

<http://www.htlv.net/>

Isoform specificity factors ruling the HP1-histone H3 interaction (2010)

Resumen

M. MACHADO , S. PANTANO

Evento: Regional

Descripción: Primer Congreso Argentino de Bioinformática y Biología Computacional

Ciudad: Quilmes (Argentina)

Año del evento: 2010

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Dinámica Molecular de Proteínas

Medio de divulgación: Otros

<http://www.a2b2c.org.ar/>

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

Resumen

A. ZEIDA , P. DANS , M. MACHADO , S. PANTANO

Evento: Regional

Descripción: Primer Congreso Argentino de Bioinformática y Biología Computacional

Ciudad: Quilmes (Argentina)

Año del evento: 2010

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Ácidos Nucleicos

Medio de divulgación: Otros

<http://www.a2b2c.org.ar/>

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

Resumen

M. MACHADO , P. DANS , L. DARRÉ , S. PANTANO

Evento: Internacional

Descripción: Workshop CeBEM | 3rd Latin American Protein Society Meeting

Ciudad: Salta (Argentina)

Año del evento: 2010

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Simulación de Biomoléculas

Medio de divulgación: Papel

www.laproteinsociety.org

A systematic docking approach to study protein-protein interactions (2009)

Resumen

M. MACHADO , S. PANTANO

Evento: Internacional
Descripción: VII Iberoamerican congress of biophysics
Ciudad: Buzios (Brasil)
Año del evento: 2009
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Estructura de Macromoléculas
Medio de divulgación: Papel
www.sbbf.org.br/congresso2009/

In silico design of anti HIV-1 compounds inhibiting human protein-protein interactions. (2008)

Resumen
M. MACHADO, S. PANTANO, V. FRECEER, S. MIERTUS

Evento: Internacional
Descripción: Workshop: Human RNA Viruses
Ciudad: Trieste (Italia)
Año del evento: 2008
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Modelado y Simulaciones Moleculares
Medio de divulgación: Papel
www.icgeb.org

Characterizing D-[Ru(bpy)2dppz]2+ DNA probe intercalative behaviour at GG, GC and CG steps. (2008)

Resumen
L. DARRÉ, M. MACHADO, E. L. COITINHO

Evento: Internacional
Descripción: Conference: Drug Design and Discovery for Developing Countries
Ciudad: Trieste (Italia)
Año del evento: 2008
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Modelado Molecular y Química Teórica
Medio de divulgación: Papel
www.ics.trieste.it

Theoretical approach to depict the HP1g - Suv39H1 interaction. Looking for a new target against HIV-1 infection. (2008)

Resumen
M. MACHADO, S. PANTANO, V. FRECEER, S. MIERTUS

Evento: Internacional
Descripción: Conference: Drug Design and Discovery for Developing Countries
Ciudad: Trieste (Italia)
Año del evento: 2008
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Modelado y Simulaciones Moleculares
Medio de divulgación: Papel
www.ics.trieste.it

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

Resumen
P. DANS, M. MACHADO, S. PANTANO

Evento: Internacional
Descripción: Conference: Drug Design and Discovery for Developing Countries
Ciudad: Trieste (Italia)
Año del evento: 2008
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Modelado y Simulaciones Moleculares
Medio de divulgación: Papel
www.ics.trieste.it

Structural Characterization of a new target against HIV-1 using theoretical methods (2008)

Resumen expandido
M. MACHADO, S. PANTANO

Evento: Internacional
Descripción: Conference: Drug Design and Discovery for Developing Countries
Ciudad: Trieste (Italia)
Año del evento: 2008
Palabras clave: HIV-1 Tat molecular dynamics modelling drug resistance Bromodomain
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Modelado Molecular
Medio de divulgación: Internet
www.ics.trieste.it

Tunneling and kinetic isotopic effects at the first step in the reaction catalyzed by ethanolamine ammonia-lyase and B12. (2007)

Resumen
S. SIGNORELLI, N. PUIG, M. MACHADO, E. L. COITIÑO

Evento: Internacional
Descripción: XXXIII Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina (QUITEL33)
Ciudad: La Habana (Cuba)
Año del evento: 2007
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Modelado Molecular y Química Teórica
Medio de divulgación: Papel
<http://karin.fq.uh.cu/quitel33>

Sequence Dependent D-[Ru(bpy)2dppz]2+ DNA Complex Dynamical Behavior. (2007)

Resumen
M. MACHADO, L. DARRÉ, E. L. COITIÑO

Evento: Internacional
Descripción: 6th International Conferences of Biological Physics & 5th Southern Cone Biophysics Congress
Ciudad: Montevideo (Uruguay)
Año del evento: 2007
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Modelado Molecular y Química Teórica
Medio de divulgación: Papel
<http://www.icbp2007.org.uy>

Modelado de la interacción del complejo [Ru(bpy)2dppz]2+ en un dodecamero de ADN: geometrías de intercalación y efectos sobre la estructura macromolecular. (2006)

Resumen
L. DARRÉ, M. MACHADO, E. L. COITIÑO

Evento: Nacional
Descripción: V Jornadas de Bioquímica y Biología Molecular
Ciudad: Montevideo (Uruguay)
Año del evento: 2006
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Modelado Molecular y Química Teórica
Medio de divulgación: Papel

One enzyme, one step in the catalyzed reaction mechanism and a continuum model to represent different local mediums at play. (2006)

Resumen
M. MACHADO, E. L. COITIÑO

Evento: Internacional

Descripción: Workshop Research trends in clusters, biomolecules and materials

Ciudad: Buenos Aires (Argentina)

Año del evento: 2006

Áreas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

http://www.giambiagi.df.uba.ar/old_/2006/A/workshop.htm

Modelling the medium's effect over a step in the reaction catalysed by the enzyme Ethanolamine ammonia lyase. (2005)

Resumen

M. MACHADO, E. L. COITIÑO

Evento: Internacional

Descripción: XXXIV Reunión Anual de la Sociedad Brasileira de Biología y Bioquímica Molecular (SBBq)

Ciudad: Aguas da Lindota (Brasil)

Año del evento: 2005

Áreas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

Efectos del entorno sobre la barrera y reorganización en la migración 1,2-NH₃ del sustrato del sistema etanolamina amonio liasa-B12. (2004)

Resumen

M. MACHADO, E. L. COITIÑO

Evento: Nacional

Descripción: III Jornadas de Bioquímica y Biología Molecular

Ciudad: Montevideo (Uruguay)

Año del evento: 2004

Áreas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

Producción técnica

PRODUCTOS

The SIRAH force field 2014 (2014)

Software, Obra

S. PANTANO, M. MACHADO, A BRANDNER, H GONZALEZ, L. DARRÉ, P. DANS, A. ZEIDA

Campo de fuerza para simulación de biomoléculas mediante modelos de grano grueso

País: Uruguay

Disponibilidad: Irrestringida

Producto con aplicación productiva o social: Investigación académica

Patente o Registro:

Derecho de autor

020086, The SIRAH force field 2014

Depósito: 07/11/2014; Examen: ; Concesión:

Patente nacional: SI

Áreas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Internet

<http://www.sirahff.com>

Formación de RRHH

TUTORÍAS CONCLUIDAS

OTRAS

Searching for novel drug targets against Dengue and Zika by molecular modeling and dynamic simulation of full viral particles (2016)

Otras tutorías/orientaciones

Sector Extranjero/Internacional/Otros / SIGMA Clermont , Francia

Tipo de orientación: Tutor único o principal

Nombre del orientado: Benoît Malye

País/Idioma: Francia, Inglés

Palabras Clave: modelos de grano grueso

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Modelado y Simulaciones Moleculares

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Virología

Pasantía de 3 meses en el Laboratorio de Biosimulaciones del Institut Pasteur de Montevideo financiada por la fundación Pierre Ledoux Jeunesse Internationale (Francia)

Use and improvement of the SIRAH force field for Coarse-Grained Simulations applied to intermolecular interactions of proteins (2016)

Otras tutorías/orientaciones

Sector Organizaciones Privadas sin Fines de Lucro/Sociedades Científico-Tecnológicas / Institut Pasteur de Montevideo , Chile

Tipo de orientación: Cotutor en pie de igualdad

Nombre del orientado: Gabriel Olguín

País/Idioma: Chile, Español

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Modelado y Simulaciones Moleculares

Pasantía de 1 mes en el Laboratorio de Biosimulaciones del institut Pasteur de Montevideo realizada en el marco del "Programa de cooperación internacional a Proyectos de apoyo a la formación de redes internacionales entre centros de Investigación" financiada por CONICYT (Chile) en coordinación con el Centro de Bioinformática de la Universidad de Talca

Use and improvement of the SIRAH force field for Coarse-Grained Simulations applied to intermolecular interactions of proteins (2016)

Otras tutorías/orientaciones

Sector Organizaciones Privadas sin Fines de Lucro/Sociedades Científico-Tecnológicas / Institut Pasteur de Montevideo , Chile

Tipo de orientación: Cotutor en pie de igualdad

Nombre del orientado: Fabián Gonzalez

País/Idioma: Chile, Español

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Modelado y Simulaciones Moleculares

Pasantía de 1 mes en el Laboratorio de Biosimulaciones del institut Pasteur de Montevideo realizada en el marco del "Programa de cooperación internacional a Proyectos de apoyo a la formación de redes internacionales entre centros de Investigación" financiada por CONICYT (Chile) en coordinación con el Centro de Bioinformática de la Universidad de Talca

TUTORÍAS EN MARCHA

POSGRADO

Desarrollo in silico de sensores fluorescentes para diseccionar vías de señalización celular (2016)

Tesis de maestría

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

Programa: Magister en Química

Tipo de orientación: Cotutor en pie de igualdad

Nombre del orientado: Florencia Klein

País/Idioma: Uruguay, Español

Palabras Clave: SIRAH force field Biosensor Fluorescente

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Modelado y Simulaciones Moleculares

Proyecto financiado con beca ANII de apoyo a la formación de posgrados

Otros datos relevantes

PREMIOS, HONORES Y TÍTULOS

Posdoctorado (2013)

(Nacional)
Institut Pasteur de Montevideo

Investigador nivel candidato del Sistema Nacional de Investigadores (2012)

(Nacional)
Agencia Nacional de Investigación e Innovación

Beca de finalización de estudios de posgrado (Doctorado) (2011)

(Nacional)
CSIC-UdelaR
Beca de 12 meses para la finalización de los estudios de Doctorado (2011-2012).

Beca de Posgrado (Maestría) (2009)

(Nacional)
Agencia Nacional de Investigación e Innovación
Beca para el desarrollo de estudios de Maestría (2009-2010)

Premio a mejor póster sección 3 (2004)

III Jornadas de Bioquímica y Biología Molecular

PRESENTACIONES EN EVENTOS

Integrative methods in Structural Biology to enhance high impact research in health and disease (2016)

Congreso
Multiscale simulations of Dengue and Zika viral particles
Uruguay
Tipo de participación: Poster
Carga horaria: 30
Nombre de la institución promotora: Institut Pasteur de Montevideo & British Council
Palabras Clave: Simulación molecular modelos de grano grueso
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Modelado y Simulaciones Moleculares
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Virología

XLV Reunión Anual SAB (2016)

Congreso
Affordable viral particle's simulations on desktop computers using SIRAH force field
Argentina
Tipo de participación: Expositor oral
Carga horaria: 24
Nombre de la institución promotora: Sociedad Argentina de Biofísica
Palabras Clave: SIRAH force field modelos de grano grueso
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Modelado y Simulaciones Moleculares

III-CCES Workshop & SAIMS (2016)

Congreso
Multiscale simulations of Dengue and Zika viral particles
Brasil
Tipo de participación: Poster
Carga horaria: 40

Nombre de la institución promotora: Universidade Estadual de Campinas
Palabras Clave: SIRAH force field modelos de grano grueso
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Modelado y Simulaciones Moleculares

iCBSM (First International Conference In Bioinformatics, Simulations And Modeling) (2015)

Simposio
SIRAH package: Features and Perspectives
Chile
Tipo de participación: Expositor oral
Carga horaria: 40
Nombre de la institución promotora: Universidad de Talca, Chile
Palabras Clave: Simulación molecular modelos de grano grueso
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Modelado y Simulaciones Moleculares

Latin American Summit Meeting on Biological Crystallography and Complementary Methods (2014)

Congreso
DNA allostery: Atomistic insights into the signal transduction mechanisms
Brasil
Tipo de participación: Poster
Carga horaria: 30
Nombre de la institución promotora: National Center for Research in Material and Energy (CNPEM), Campinas-SP
Palabras Clave: Biología Estructural Cristalografía
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Otras Ciencias Naturales / Otras Ciencias Naturales / Biología Estructural

4to. Congreso Argentino de Bioinformática y Biología Computacional (4CAB2C) y 4ta. Conferencia Internacional de la Sociedad Iberoamericana de Bioinformática (SolBio) (2013)

Congreso
Multiscale simulations: mixing SIRAH and AMBER force fields to explore the LacI-DNA dynamics
Argentina
Tipo de participación: Poster
Nombre de la institución promotora: A2B2C y SolBio
Palabras Clave: Lac Operon Multiscale modelling
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Modelado y simulación molecular

30 years of HIV science: Imagine the future (2013)

Congreso
Integrative modeling of HIV-1 provirus: From knowledge to structure
Francia
Tipo de participación: Poster
Nombre de la institución promotora: Institut Pasteur
Palabras Clave: HIV-1 Molecular Modeling Genome
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Modelado y simulación molecular

ISCB Latin America Conference on Bioinformatics. (2012)

Congreso
Cross talk between DNA and transcription factors
Chile
Tipo de participación: Expositor oral
Nombre de la institución promotora: ISCB - International Society for Computational Biology
Palabras Clave: Simulación molecular Modelos simplificados Factores de transcripción Secuencias promotoras
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Modelado y Simulaciones Moleculares

3rd ICGB Workshop on Human RNA Viruses (2012)

Congreso
Modeling the macromolecular assembly of the HIV-1 provirus
Argentina
Tipo de participación: Expositor oral
Nombre de la institución promotora: ICGEB - International Center for Genetic Engineering and Biotechnology
Palabras Clave: HIV-1 Modelado molecular
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Modelado y Simulaciones Moleculares

Coarse-Grained Biomolecular Modeling (2011)

Taller
Pushing forward multiscale simulations of DNA
Suiza
Tipo de participación: Poster
Nombre de la institución promotora: Centre Européen de Calcul Atomique et Moléculaire
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Acidos Nucleicos
Primer autor

Segundo Congreso Argentino de Bioinformática y Biología Computacional (2011)

Congreso
Plug and play model to perform multiscale simulations with DNA
Argentina
Tipo de participación: Expositor oral
Nombre de la institución promotora: Asociación Argentina de Bioinformática y Biología Computacional
Palabras Clave: ADN Simulación molecular Modelos simplificados
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Simulación de Biomoléculas
Primer autor

Molecular Biology of Viral Diseases (2011)

Simposio
Tackling Silencing-Activation of HIV-1 Transcription
Uruguay
Tipo de participación: Poster
Carga horaria: 40
Nombre de la institución promotora: Facultad de Ciencias - UdelaR
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular / Virología
Primer autor

Primer Congreso Argentino de Bioinformática y Biología Computacional (2010)

Congreso
Improving the performance of our coarse-grain model for dna simulations
Argentina
Tipo de participación: Poster
Nombre de la institución promotora: Asociación Argentina de Bioinformática y Biología Computacional
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Acidos Nucleicos
Coautor del Póster

Primer Congreso Argentino de Bioinformática y Biología Computacional (2010)

Congreso
Isoform specificity factors ruling the HP1-histone H3 interaction
Argentina
Tipo de participación: Expositor oral
Nombre de la institución promotora: Asociación Argentina de Bioinformática y Biología Computacional
Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Modelado y Simulaciones Moleculares
Primer autor

Workshop CeBEM | 3rd Latin American Protein Society Meeting (2010)

Congreso
3D scaled model of HIV-1 transcriptional machinery
Argentina
Tipo de participación: Poster
Nombre de la institución promotora: LAPSM; SAB; CeBEM
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Simulación de Biomoléculas
Primer autor

VII Iberoamerican Congress of Biophysics (2009)

Congreso
A systematic docking approach to study protein-protein interactions
Brasil
Tipo de participación: Poster
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Estructura de Macromoléculas
Primer autor

Drug Design and Discovery for Developing Countries, Trieste (2008)

Congreso
Development of a coarse-grained model of DNA and bulk water to tackle the simulation of DNA-drug interactions at the mesoscopic scale
Italia
Tipo de participación: Otros
Nombre de la institución promotora: ICS-UNIDO
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Modelado Molecular
Coautor del Póster

Drug Design and Discovery for Developing Countries, Trieste (2008)

Congreso
Theoretical approach to depict the HP1g-Suv39H1 interaction. Looking for a new target against HIV-1 infection
Italia
Tipo de participación: Poster
Nombre de la institución promotora: ICS-UNIDO
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Modelado y Simulaciones Moleculares
Primer autor

Drug Design and Discovery for Developing Countries, Trieste (2008)

Congreso
Characterizing D-[Ru(bpy)₂dppz]²⁺ DNA probe intercalative behaviour at GG, GC and CG steps
Italia
Tipo de participación: Expositor oral
Nombre de la institución promotora: ICS-UNIDO
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Modelado Molecular y Química Teórica
Póster

Workshop: Human RNA Viruses (2008)

Congreso
In silico design of anti HIV-1 compounds inhibiting human protein-protein interactions
Italia
Tipo de participación: Expositor oral
Nombre de la institución promotora: The International Center for Genetic Engineering and

Biotechnology (ICGEB)
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Modelado Molecular
Presentación Oral (15min)

Ciclo de Seminarios del Instituto de Química Biológica (2007)

Seminario
Estructura y dinámica de la hidratación alrededor de interruptores moleculares de luz: el caso del complejo Ru(bpy)₂(dppz)]²⁺
Uruguay
Tipo de participación: Expositor oral
Nombre de la institución promotora: Instituto de Química Biológica, FCien
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Modelado Molecular y Química Teórica
Presentación Oral (15min)

6th International Conferences of Biological Physics & 5th Southern Cone Biophysics Congress (2007)

Otra
Sequence Dependent D-[Ru(bpy)₂dppz]²⁺-DNA Complex Dynamical Behavior
Uruguay
Tipo de participación: Otros
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Modelado Molecular y Química Teórica
Coautor del Poster

XXXIII Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina (QUITEL33) (2007)

Congreso
Tunneling and kinetic isotopic effects at the first step in the reaction catalyzed by ethanolamine ammonia-lyase and B12
Cuba
Tipo de participación: Expositor oral
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Modelado Molecular y Química Teórica
Coautor del trabajo, no expositor.

1º Encuentro Nacional de Educación Ambiental para el desarrollo humano sustentable (2006)

Encuentro
Educando en Química de la Atmósfera y Polución: Experiencias Universitarias Presenciales y a Distancia, Reflexiones y Propuestas
Uruguay
Tipo de participación: Poster
Nombre de la institución promotora: Red Nacional de Educación Ambiental para el Desarrollo Humano Sustentable
Areas de conocimiento:
Ciencias Sociales / Ciencias de la Educación / Educación General
Autores: Matías Machado, Pablo Dans & E. Laura Coitiño

Research trends in clusters, biomolecules and materials (2006)

Taller
One enzyme, one step in the catalyzed reaction mechanism and a continuum model to represent different local mediums at play
Argentina
Tipo de participación: Expositor oral
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Modelado Molecular y Química Teórica
Póster

V Jornadas de Bioquímica y Biología Molecular (2006)

Congreso

Modelado de la interacción del complejo [Ru(bpy)2dppz]2+ en un dodecamero de ADN: geometrías de intercalación y efectos sobre la estructura macromolecular

Uruguay

Tipo de participación: Otros

Nombre de la institución promotora: Sociedad de Bioquímica y Biología Molecular (SBBM)

Áreas de conocimiento:

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

Electroquímica / Modelado Molecular y Química Teórica

Coautor del Póster

2º Seminario - Taller La Enseñanza de las Ciencias y el ingreso a la Universidad (2005)

Seminario

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

Uruguay

Tipo de participación: Poster

Nombre de la institución promotora: Facultad de Ciencias, Uruguay

Áreas de conocimiento:

Ciencias Sociales / Ciencias de la Educación / Educación General

Autores: E. Laura Coitiño, Pablo Dans, Vanessa Leone, Alexandra Castro & Matías Machado

XXXIV Reunión Anual de la Sociedad Brasileira de Biología y Bioquímica Molecular (2005)

Congreso

Modelling the medium's effect over a step in the reaction catalysed by the enzyme Ethanolamine ammonia lyase

Brasil

Tipo de participación: Expositor oral

Nombre de la institución promotora: Sociedad Brasileira de Biología y Bioquímica Molecular (SBBQ)

Áreas de conocimiento:

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

Electroquímica / Modelado Molecular y Química Teórica

Póster y Presentación Oral (15min)

III Jornadas de Bioquímica y Biología Molecular (2004)

Congreso

Efectos del entorno sobre la barrera y reorganización en la migración 1,2-NH3 del sustrato del sistema etanolamina amonio liasa-B12

Uruguay

Tipo de participación: Expositor oral

Nombre de la institución promotora: Sociedad de Bioquímica y Biología Molecular (SBBM)

Áreas de conocimiento:

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

Electroquímica / Modelado Molecular y Química Teórica

Póster

Indicadores de producción

PRODUCCIÓN BIBLIOGRÁFICA	37
Artículos publicados en revistas científicas	15
Completo	15
Trabajos en eventos	20
Libros y Capítulos	2
Libro publicado	1
Capítulos de libro publicado	1
PRODUCCIÓN TÉCNICA	1
Productos tecnológicos	1
Con registro o patente	1
FORMACIÓN RRHH	4

Tutorías/Orientaciones/Supervisiones concluidas	3
Otras tutorías/orientaciones	3
Tutorías/Orientaciones/Supervisiones en marcha	1
Tesis de maestría	1