



MAURICIO ANGEL VEGA  
TEIJIDO

Dr

[mauryvg@gmail.com](mailto:mauryvg@gmail.com)  
[http://buscatextual.cnpq.br/  
buscatextual/visualizacv.jsp?  
id=K4706412D8  
0059891082595](http://buscatextual.cnpq.br/buscatextual/visualizacv.jsp?id=K4706412D80059891082595)

Fecha de publicación: 22/12/2019  
Última actualización: 22/12/2019

## Datos Generales

### INSTITUCIÓN PRINCIPAL

Universidad de la República/ Facultad de Química - UDeLaR/ DETEMA / Uruguay

### DIRECCIÓN INSTITUCIONAL

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

Dirección: Isidoro de María 1614, piso 4 esq. José L. Terra / 11800 / Montevideo, Montevideo, Uruguay

Teléfono: (2) 924 1860

Correo electrónico/Sitio Web: [mauryvg@gmail.com](mailto:mauryvg@gmail.com) [https://exportcvuy.anii.org.uy/pdf/?672abfaee668d8143a7b356856ae2d1b3876cb1cb1c28383aef4dbd8dbc4cdfa469351307b069733b](https://exportcvuy.anii.org.uy/pdf/672abfaee668d8143a7b356856ae2d1b3876cb1cb1c28383aef4dbd8dbc4cdfa469351307b069733b)

## Formación

### Formación académica

#### CONCLUIDA

#### DOCTORADO

##### Doutorado em Química - FísicoQuímica (1999 - 2003)

Universidade Federal de São Carlos, Brasil

Título de la disertación/tesis/defensa: Simulação Computacional: formação de complexos proteína-ligante aplicada ao estudo das flavoenzimas glutatona redutase e tripanotona redutase, importantes em doenças parasitárias.

Tutor/es: Julio Zukerman-Schpector

Obtención del título: 2003

Financiación:

Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo, Brasil

Palabras Clave: docking Modelado Molecular Tripanosoma cruzi nitrofuranos naftoquinonas

Áreas de conocimiento:

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

#### MAESTRÍA

##### Maestría en Química (UDELAR-PEDECIBA) (1996 - 1999)

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

Título de la disertación/tesis/defensa: Aplicaciones del modelado y la simulación dinámica molecular en sistemas biomoleculares. Estudio de propiedades estructurales e implicancias biológicas: EgDf1 de Echinococcus granulosus y CreA de Aspegillus nidulans.

Tutor/es: Margot Paulino

Obtención del título: 1999

Palabras Clave: Dinámica Molecular Echinococcus granulosus Aspegillus nidulans Proteínas ADN

Factores de transcripción

Áreas de conocimiento:

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

#### ESPECIALIZACIÓN/PERFECCIONAMIENTO

##### (2007 - 2010)

Universidad Estadual Paulista, Brasil

Título de la disertación/tesis/defensa: ESTUDOS ESTRUTURAIS, DE DOCKING E DE DINAMICA MOLECULAR APLICADOS A INIBICAO ENZIMATICA DE CISTEINO PROTEASES POR ORGANOCALCOGENICOS.

Tutor/es: Responsable: Mauricio Angel Vega Teijido

Obtención del título: 2010

Palabras Clave: docking telúrio catepsina B cisteino proteasas artritis cancer

Areas de conocimiento:

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

### **(2003 - 2006)**

Universidade Federal de São Carlos , Brasil

Título de la disertación/tesis/defensa: COMPOSTOS ORGANOTELÚRICOS: ESTUDOS CRISTALOGRAFICOS, ANÁLISE CONFORMACIONAL E MODELAGEM MOLECULAR DAS SUAS INTERAÇÕES COM CISTEÍNO-PROTEASES.

Tutor/es: Supervisor: Julio Zukerman-Schpector

Obtención del título: 2006

Palabras Clave: docking telúrio catepsina B cisteino proteasas artritis cancer

Areas de conocimiento:

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

## **GRADO**

### **Química Farmacéutica (1993 - 1998)**

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

Título de la disertación/tesis/defensa:

Obtención del título:

Palabras Clave: Química Farmacéutica

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Núcleo Básico de Facultad de Química

## **PREGRADO**

### **Bachiller en Química (1988 - 1996)**

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

Título de la disertación/tesis/defensa:

Obtención del título: 1996

Palabras Clave: Química Farmacéutica

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Núcleo Básico de Facultad de Química

## Formación complementaria

## **CONCLUIDA**

### **CURSOS DE CORTA DURACIÓN**

#### **El Aprendizaje en la Educación Superior (01/2013 - 01/2013)**

Sector Educación Superior/Privado / Universidad ORT Uruguay / Universidad ORT Uruguay - Instituto de Educación , Uruguay

Palabras Clave: Pedagogía Universitaria

Areas de conocimiento:

Ciencias Sociales / Ciencias de la Educación / Educación General / Tecnología educativa

#### **La evaluación de los aprendizajes en la universidad (01/2012 - 01/2012)**

Sector Educación Superior/Privado / Universidad ORT Uruguay / Universidad ORT Uruguay - Instituto de Educación , Uruguay

Palabras Clave: Pedagogía Universitaria

Areas de conocimiento:

Ciencias Sociales / Ciencias de la Educación / Educación General / Tecnología educativa

**La planificación en la tarea docente (01/2012 - 01/2012)**

Sector Educación Superior/Privado / Universidad ORT Uruguay / Universidad ORT Uruguay - Instituto de Educación , Uruguay  
Palabras Clave: Pedagogía Universitaria  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Sociales / Ciencias de la Educación / Educación General / Tecnología educativa

**La tecnología educativa en la educación superior (01/2011 - 01/2011)**

Sector Educación Superior/Privado / Universidad ORT Uruguay / Universidad ORT Uruguay - Instituto de Educación , Uruguay  
Palabras Clave: tecnología educativa  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Sociales / Ciencias de la Educación / Educación General / Tecnología educativa

**Carpe Diem: curso de pedagogía en cursos en línea. (01/2010 - 01/2010)**

Sector Educación Superior/Privado / Universidad ORT Uruguay / Universidad ORT Uruguay - Instituto de Educación , Uruguay  
6 horas  
Palabras Clave: clases en línea  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Sociales / Ciencias de la Educación / Educación General / Clases en línea

**Computational Modelling and Simulations of Biological Systems. Theoretical and Practical Course and Workshop (01/2010 - 01/2010)**

Sector Organizaciones Privadas sin Fines de Lucro/Sociedades Científico-Tecnológicas / Institut Pasteur de Montevideo / Institut Pasteur de Montevideo , Uruguay  
49 horas  
Palabras Clave: Modelado Molecular  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química / Métodos Teóricos de Modelado Molecular

**Química Quântica: A Solução Ideal para os Problemas Reais (01/2003 - 01/2003)**

, Uruguay  
10 horas

**Funcionales de Densidad Electrónica - QUITEL 2002 (01/2002 - 01/2002)**

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

**Drug Design Structure Based and Computational Approaches (01/2001 - 01/2001)**

, Uruguay  
10 horas

**Análise Multivariadas de Dados de Química (01/2001 - 01/2001)**

Sector Extranjero/Internacional/Otros / Universidad Federal de Sao Carlos , Brasil  
42 horas

**Introdução à Química Supramolecular (01/2000 - 01/2000)**

Sector Extranjero/Internacional/Otros / Universidade Federal de São Carlos , Brasil  
10 horas

**Bases Moleculares, Bioquímicas e Inmunológicas de la Interacción hospedero-parásito (01/1997 - 01/1997)**

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

**Idiomas**

## Español

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

## Portugués

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

## Inglés

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

## Áreas de actuación

### CIENCIAS NATURALES Y EXACTAS

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

### CIENCIAS NATURALES Y EXACTAS

Ciencias Biológicas /Biofísica /Biofísica Estructural

### CIENCIAS NATURALES Y EXACTAS

Ciencias Físicas /Física Atómica, Molecular y Química/Química Cuántica aplicada al Modelado Molecular

## Actuación profesional

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

Facultad de Química - UDeLaR / CCBG/DETEMA

### VÍNCULOS CON LA INSTITUCIÓN

#### **Funcionario/Empleado (07/2014 - a la fecha)** Trabajo relevante

Investigador y Docente ,30 horas semanales

Cargo de Prof. Ajunto 30/sem asociado a la investigación y dictado del curso de Cálculo Numérico y Computación y Físicoquímica Molecular Básica. Recientemente nombrado profesor Efectivo (dic 2019) y en vías de tramitar la Dedicación Total.

Escalafón: Docente

Grado: Grado 3

Cargo: Efectivo

#### **Colaborador (08/2013 - a la fecha)**

Educ. a Distancia Maest. Bioinfor/PEDECIBA ,4 horas semanales

Participación como colaborador con la Lic. Ivana Núñez en el proyecto ganador del llamado para implementar la modalidad semi-presencial y a distancia de todos los cursos de la Maestría en Bioinformática/PEDECIBA.

Escalafón: Docente

Grado: Grado 3

Cargo: Interino

#### **Funcionario/Empleado (06/2011 - 06/2014)** Trabajo relevante

Investigador y Docente ,20 horas semanales

El cargo docente Profesor Adjunto (Esc. G, Grado 3, 20 hs. sem.) está asociado a trabajos de investigación científica en el Computational Chemistry and Biology Group- DETEMA. Tiene una extensión horaria a 30hs semanales con fondos de la Maestría en Bioinformática/PEDECIBA.

Escalafón: Docente

Grado: Grado 3

Cargo: Interino

#### **Profesor visitante (07/2010 - 05/2011)**

Profesor Asociado ,20 horas semanales

Este vínculo es una primera etapa de relacionamiento con la institución en que estamos tramitando

nuestro retorno al país para continuar desarrollando nuestra carrera científica como participante activo en el desarrollo y la enseñanza de la ciencia en Uruguay.

Escalafón: Docente

Grado: Grado 3

Cargo: Honorario

## ACTIVIDADES

### LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN

#### **Estudio computacional, comparación experimental y prospectiva de colorantes tipo BODIPY conteniendo calcógenos (S, Se, Te). (07/2017 - a la fecha )**

Este proyecto forma parte de una nueva línea de investigación que hemos iniciado a instancias del proyecto de doctorado del Ing. Gabriel Estévez. Actualmente la estudiante de la carrera de Químico, opción Materiales, Lucía Suárez ha estado participando en su entrenamiento y en el desarrollo de actividades de investigación dentro de este proyecto. El 17 de octubre próximo será presentado por dicha estudiante un E-poster resumiendo algunos estudios de esta línea de investigación. Es una línea que requerirá de bastante tiempo de estudio y cálculos por lo que tenemos la idea de transformarlo en un proyecto más amplio y de largo alcance en el tiempo.

Fundamental

4 horas semanales , Coordinador o Responsable

Equipo: Mauricio Angel VEGA TEIJIDO

#### **Primeros pasos hacia una comprensión molecular de las semejanzas estructurales y diferencias mecanísticas de las dioxigenasas de escisión de carotenoides del tipo 4 (CCD4) en especies cítricas (03/2013 - a la fecha )**

Este proyecto es llevado adelante junto a la Dra. Paulino. Los trabajos relacionados a carotenoides son los inscriptos dentro de este proyecto de investigación. Este proyecto ha rendido una publicación en noviembre de 2018 y tiene otra en camino. Los trabajos de la Maestría en Bioinformática de Jorge Cantero pertenecen a esta línea de investigación.

Mixta

4 horas semanales , Integrante del equipo

Equipo: Mauricio Angel VEGA TEIJIDO , Margot PAULINO , Jorge Cantero

#### **Modelado Molecular y estudios teórico-computacionales de inhibición de cisteína proteasas por compuestos formadores de puentes disulfuro (07/2010 - a la fecha )**

El objetivo de este proyecto es la realización de un trabajo teórico-computacional integrado aplicado al modelado molecular y estudio teórico de los complejos de la catepsina B con inhibidores formadores de puente disulfuro, lo que debe derivar en la propuesta de nuevos compuestos potencialmente activos. Para que los objetivos propuestos sean alcanzados, será necesario un modelado adecuado de los ligandos y el estudio detallado de su estructura molecular y propiedades físicas y químicas. Estas informaciones son fundamentales para tener una visión más amplia del mecanismo de inhibición y complementar así el análisis de los resultados de docking. En la construcción y estudio de los complejos con la catepsina B, serán utilizadas todas las informaciones físicas, químicas e bioquímicas que dispongamos, de forma a garantizar resultados realísticos que sustenten las proyecciones futuras. Eventualmente, sistemas moleculares reducidos derivados de los complejos de inhibición y sistemas polimoleculares que incluyan a interacción química de interés, podrán ser estudiados en detalle utilizando para esta etapa un nivel cuántico de la teoría aplicada. De forma general, se pretende realizar un abordaje computacional múltiple que permita estudiar este tipo de complejos, así como, lograr un mayor entendimiento de los fenómenos relacionados con la inhibición de las cisteína proteasas, y por lo tanto, obtener informaciones que deriven en la optimización estructural de inhibidores de la catepsina B.

20 horas semanales

CCBG, DETEMA, Facultad de Química , Coordinador o Responsable

Equipo: VEGA-TEIJIDO, MA

Palabras clave: docking Modelado Molecular catepsina B

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química / Métodos Teóricos de Modelado Molecular

#### **Nanotransductores en procesos celulares de señales redox efectuados por especies reactivas de oxígeno (06/2011 - a la fecha )**

Óxido-reducción de residuos con azufre y selenio en proteínas, inhibidores y biomiméticos

involucrados en los procesos de regulación redox.

20 horas semanales

CCBG, DETEMA, Facultad de Química, Integrante del equipo

Equipo: OSCAR N. VENTURA, MARTINA KIENINGER, KENNETH IRVING, RAÚL E. CACHAU, ALINE KATZ, FIORENTINA BOTTINELLI, EDUARDO BERMÚDEZ

Palabras clave: telurio Química Cuántica redox selenio peroxidasa selenoproteínas

Áreas de conocimiento:

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

**Estudios de docking, simulación molecular y químico cuánticos del mecanismo de acción de la metionina sulfóxido reductasa B (MsrB) del organismo fitopatógeno Xanthomonas campestris. (03/2014 - a la fecha)**

Las metionina-sulfóxido reductasas (Msr) son una familia de enzimas que reducen metionina sulfóxido (Met-SO), libre o en cadenas proteicas. Estas últimas pueden ser producto del estrés oxidativo o formar parte de mecanismos de señalización intracelular (Kim and Gladyshev, PLoS Biology, 2005. 3(12): 1-10.). La reducción de Met-SO, es considerada una importante vía de reparación proteica que ofrece protección contra el estrés oxidativo, retarda el envejecimiento y en algunos casos funciona como etapa de señalización intracelular (Weissbach et al. Biochimica et Biophysica Acta - Proteins and Proteomics, 2005. 1703(2):203-212). Este tipo de enzimas también han sido descritas en organismos patógenos, en particular existen enzimas del tipo MsrB en bacterias como Neisseria meningitidis (patógeno en humanos) y Xanthomonas campestris (fitopatógeno), cuyas diferencias estructurales han sido blanco de un reciente estudio cristalográfico (Ranaivoson et al., J. Mol. Biol. 2009. 394: 8393). Se ha reportado recientemente (del Campo et al., FEMS Microbiol Lett. 2009. 298: 143-148) que por la acción de agentes químicos que contienen Cu(2+), los cuales catalizan la formación de especies de oxígeno reactivo (ROS), las Xanthomonas axonopodis pv. citri (la subespecie causante del chancro cítrico más severo) son capaces de entrar en un estado latente Viable No Cultivable (VNC) frente al estrés oxidativo. Este mecanismo es visto como una estrategia de supervivencia, y una vez dadas las condiciones favorables, estas bacterias pueden retomar su crecimiento, manteniendo su virulencia. Este proyecto se propone estudiar desde varios abordajes teórico-computacionales el mecanismo de funcionamiento de la MsrB presente en la especie Xanthomonas. La MsrB de este especie se diferencia de otras por una alta flexibilidad y grandes cambios conformacionales a largo de las etapas de su función catalítica (Ranaivoson et al., J. Mol. Biol. 2009. 394: 8393). En particular, pretendemos estudiar el sistema molecular de MsrB de Xanthomonas con sus posibles sustratos y posibles inhibidores mediante métodos de docking y Dinámica Molecular. En paralelo, mediante métodos químico-cuánticos nos proponemos estudiar los detalles de los cambios químico-electrónicos del mecanismo de catálisis desde su inicio en la preactivación de la Cys117 a la forma tiolato hasta su forma sulfénico, una vez que el ligando fue reducido de metionina sulfóxido a metionina. La conjunción de los datos obtenidos del abordaje químico-cuántico con los obtenidos de la simulación dinámica de la proteína nos permitirá tener un sinergismo entre ambos para construir complejos moleculares que nos permitan realizar los estudios cuánticos y a partir de ellos simular correctamente el estado de protonación, de enlaces químicos y de solvatación necesarios para una adecuada simulación del sistema en su conjunto.

Mixta

20 horas semanales

CCBG, DETEMA, Facultad de Química, Coordinador o Responsable

Equipo: VENTURA O.N., KIENINGER M.

Palabras clave: docking Dinámica Molecular Xanthomonas campestris

Áreas de conocimiento:

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

**PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN Y DESARROLLO**

**Nanotransductores en procesos celulares de señales redox efectuadas por especies reactivas de oxígeno (06/2011 - a la fecha)**

En este proyecto se procura obtener información detallada de los mecanismos de reacción de enzimas involucradas en la transmisión de señales redox donde el H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> funciona como mensajero secundario, enzimas todas que funcionan mediante óxido-reducción de tioles y selenoles o sus óxidos, investigando no sólo las enzimas nati-vas sino mutaciones teóricas (i.e. generadas computacionalmente) donde las Cys o Sec catalíticas o resolventoras son mutadas por aminoácidos estructuralmente similares (incluyendo los ortólogos generados por intercambio de ambos aminoácidos y sustituciones por HCys). También, se intenta comprender los mecanismos de inhibición

de enzimas por compuestos de calcógenos superiores (S, Se, Te) así como el diseño y comportamiento de biomiméticos que simulen eficientemente la actividad de las enzimas estudiadas.

20 horas semanales

CCBG, DETEMA, Facultad de Química

Investigación

En Marcha

Alumnos encargados en el proyecto:

Pregrado:1

Doctorado:1

Financiación:

Comisión Sectorial de Investigación Científica - UDeLaR, Uruguay, Apoyo financiero

Equipo: OSCAR N. VENTURA (Responsable), MARTINA KIENINGER, KENNETH IRVING, RAÚL E. CACHAU, ALINE KATZ, FIORENTINA BOTTINELLI, EDUARDO BERMÚDEZ, MAURICIO A. VEGA-TEIJIDO

Palabras clave: telúrio Química Cuántica peróxidos selenio peroxidasa selenoproteínas

Areas de conocimiento:

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

#### **Proyecto de Inserción PEDECIBA/Química (12/2012 - a la fecha)**

Coordinador Responsable: Mauricio A. Vega Teijido Fuimos seleccionados para recibir apoyo económico de \$U 100.000 para equipamiento e infraestructura de trabajo de investigación. Con los fondos fueron adquiridos: a) 2 computadoras con procesadores Intel i7 (8 cores) y 1TB de HD para desarrollo de investigación, b) un notebook y cañon proyector para difusión de los trabajos y docencia, c) software de estudio de la densidad electrónica.

20 horas semanales

DETEMA, Facultad de Química, CCBG

Investigación

Coordinador o Responsable

En Marcha

Financiación:

Programa de Desarrollo de las Ciencias Básicas, Uruguay, Apoyo financiero

Equipo: VEGA-TEIJIDO MA

Palabras clave: Química Computacional

Areas de conocimiento:

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

#### **Implementación de Cursos Semi-presenciales de la Maestría en Bioinformática/PEDECIBA (08/2013 - a la fecha)**

Responsables: Ivana Núñez y Mauricio A. Vega Teijido Este proyecto fue el ganador del proceso de selección de la coordinación de la Maestría en Bioinformática/PEDECIBA para llevar adelante el desarrollo y la implementación de todas las materias de la maestría en un formato semi-presencial (y en algunos casos totalmente a distancia).

4 horas semanales

Facultad de Química, Maestría en Bioinformática/PEDECIBA

Desarrollo

Integrante del Equipo

En Marcha

Financiación:

Programa de Desarrollo de las Ciencias Básicas, Uruguay, Cooperación

Equipo: Mauricio Angel VEGA TEIJIDO, NÚÑEZ, I. (Responsable)

Palabras clave: Educación a Distancia

Areas de conocimiento:

Ciencias Sociales / Ciencias de la Educación / Educación General / Educación a Distancia

#### **DOCENCIA**

##### **(10/2011 - 10/2011)**

Doctorado

Responsable

Asignaturas:

Métodos de simulação de complexos moleculares em Materiais Biológicos: algoritmos e funções de

energía, 8 horas, Teórico

Áreas de conocimiento:

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

**(11/2010 - 12/2010)**

Doctorado

Responsable

Asignaturas:

Curso de Profundización PEDECIBA-Química. Modelado de complejos Receptor-Ligando a través de métodos de docking con Algoritmos Genéticos., 4 horas, Teórico-Práctico

Áreas de conocimiento:

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

**SECTOR EDUCACIÓN SUPERIOR/PRIVADO - UNIVERSIDAD ORT URUGUAY - URUGUAY**

Universidad ORT Uruguay - Facultad de Ingeniería

**VÍNCULOS CON LA INSTITUCIÓN**

**Funcionario/Empleado (03/2011 - a la fecha)** Trabajo relevante

Prof.Adj. Físicoquímica Lic. en Biotecnología, 8 horas semanales

Actividades docentes (junto a la Ing. Adriana Gamboggi) de preparación de curso y dictado de las disciplinas: Físicoquímica I y II.

**ACTIVIDADES**

**DOCENCIA**

**Licenciatura en Biotecnología (03/2011 - a la fecha)**

Grado

Responsable

Asignaturas:

Físicoquímica I, 4 horas, Teórico

Físicoquímica II, 4 horas, Teórico

Áreas de conocimiento:

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

**SECTOR EXTRANJERO/INTERNACIONAL/ENSEÑANZA SUPERIOR - BRASIL**

**VÍNCULOS CON LA INSTITUCIÓN**

**Profesor visitante (06/2007 - 05/2010)**

Joven Investigador en Centros Emergentes, 40 horas semanales / Dedicación total  
Proyecto de Investigación financiado por FAPESP (Proceso 2006/56078-4).

**ACTIVIDADES**

**PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN Y DESARROLLO**

**Modelagem Molecular e estudos teórico-computacionais da inibição da catepsina B humana por ligandos derivados do 1,2,4-tiadiazol e da 2-tiopiridina (11/2008 - 12/2010)**

El objetivo de este proyecto es el modelado y estudio de los complejos moleculares de inhibidores formadores de puentes disulfuro (derivados de tiadiazoles y de 2-tiopiridina) con la cisteína-proteasa catepsina B. El estudio teórico-computacional podrá ofrecer una mayor comprensión del mecanismo de inhibición, lo que debería resultar en informaciones valiosas para la sugerencia y diseño de nuevos compuestos potencialmente más activos. La importancia de la inhibición de la catepsina B está dada por la relación que existe entre su sobreactividad y afecciones como a artritis reumática, osteoporosis, distrofia muscular e metástasis tumoral. Las metodologías a ser utilizadas son parte de un estudio teórico integrado que incluye modelado molecular de la serie de ligandos,



estudios de docking para la construcción y estudio de los complejos y finalmente un estudio químico-cuántico de un posible mecanismo de inhibición de este tipo de compuestos. Proyecto CNPq 473265/2008-7 con recursos en un total de R\$ 12.000.

40 horas semanales

Faculdade de Ciências , BioMat, Capus de Bauru

Investigación

Coordinador o Responsable

En Marcha

Alumnos encargados en el proyecto:

Pregrado:2

Financiación:

Institución del exterior, Apoyo financiero

Equipo: VEGA-TEIJIDO MA (Responsable) , BONTURI C , EL CHAMY MALUF S

Palabras clave: docking Modelado Molecular catepsina B cisteino proteasas tiadiazoles tiopiridinas

Areas de conocimiento:

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

### **Estudos estruturais, de docking e de Dinâmica Molecular aplicados à inibição enzimática de cisteino-proteases por organocalcogênios (06/2007 - 05/2010)**

Este proyecto apunta a la realización, en paralelo, de dos abordajes computacionales que confluyen en un estudio mas amplio: a) el modelado de los complejos de inhibición de organocalcogénos con la cisteino proteasa catepsina B, b) estudios teóricos químico-cuánticos aplicados a compuestos organo-calcogénicos (principalmente S, Se y Te) con énfasis en aquellos derivados halogenados. La línea de investigación referente a los organocalcogénos tiene su foco en estudios químico-cuánticos buscando una mejor descripción de las propiedades electrónicas de este tipo de sistemas moleculares con gran número de electrones. El proyecto incluye estudios teóricos de la densidad electrónica, los cuales son muy útiles para caracterizar las interacciones entre los átomos (covalentes, iónicas, secundarias, etc). Este tipo de compuestos presenta capacidades especiales de interacción tales como interacciones secundarias, hipervalencia o hiperconjugación; estas propiedades son de gran interés científico por su comportamiento electrónico diferenciado, así como por las aplicaciones al modelado de los complexos con la catepsina B, la química supramolecular en geral y por consiguiente, al desarrollo de nuevos materiales. Algunas de las afecciones que han sido relacionadas con una sobreactividad de la catepsina B, o donde a su inhibición seria provechosa son: artritis reumática, osteoporosis, distrofia muscular e metástasis tumoral. Los trabajos de modelado de los complexos de organocalcogénos con la catepsina B tendrán estudios de docking, como tema inicial, y un posterior estudio das propiedades dinámicas da enzima e dos complexos estudiados. En los estudios de docking de los compuestos orgánicos de calcogénos la transferencia de informaciones que puedan surgir de los trabajos de química-cuántica, dará una visión mas amplia de los eventos que ocurren en la inhibición de la catepsina B. Processo FAPESP 06/56078-4. Recursos en un total de U\$S 21,240,00 e R\$ 56,485,70 (Mat.Perm.+Serv.Terc.+Res.Tec.)

40 horas semanales

Faculdade de Ciências , BioMat, Campus de Bauru

Investigación

Coordinador o Responsable

En Marcha

Alumnos encargados en el proyecto:

Pregrado:2

Financiación:

Institución del exterior, Apoyo financiero

Institución del exterior, Beca

Equipo: VEGA-TEIJIDO MA (Responsable) , BONTURI C , EL CHAMY MALUF S

Palabras clave: docking Modelado Molecular telúrio catepsina B cisteino proteasas ab initio

Areas de conocimiento:

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

### **DOCENCIA**

#### **(06/2010 - 06/2010)**

Doctorado

Responsable

Asignaturas:

Tópicos em Modelagem Molecular: Aplicações com GAUSSIAN e GAMESS., 4 horas, Teórico-Prático

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química / Métodos Teóricos de Modelado Molecular

**(06/2007 - 12/2009 )**

Grado

Responsable

Asignaturas:

Curso de Física General con enfoque en temas de interés de las Ciencias Biológicas, 4 horas, Teórico-Prático

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química / Física Clásica, Electromagnetismo, Hidrostática y Radiaciones

**(03/2008 - 05/2008 )**

Grado

Responsable

Asignaturas:

Física Geral para Matematica, 4 horas, Teórico-Prático

Areas de conocimiento:

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

**(05/2008 - 05/2008 )**

Grado

Asistente

Asignaturas:

Mini-Curso "Bioinformática" (Resp. Ignez Caracelli; Asist. Mauricio Vega-Tejido) en la XV Semana da Biologia, FC, UNESP/Bauru / 8 hs sem. / Teórico-Prático, 8 horas, Teórico-Prático

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química / Estructura de Biomoléculas y Modelado Molecular

**EXTENSIÓN**

**Simulação Molecular: fazendo ciência in silico (Seminário de divulgação docente en el Programa de Seminários del Departamento de Física, DF, UNESP/Bauru) (11/2008 - 11/2008 )**

Faculdade de Ciências, UNESP/Bauru, Departamento de Física

1 horas

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química / Métodos Teóricos de Modelado Molecular

**SECTOR EXTRANJERO/INTERNACIONAL/OTROS - BRASIL**

Universidade Federal de São Carlos / Departamento de Química

**VÍNCULOS CON LA INSTITUCIÓN**

**Otro (06/2003 - 05/2007)**

Posdoctorado ,40 horas semanales / Dedicación total

Con beca FAPESP de Posdoctorado hasta 05/2006 y un año más como Colaborador honorário.

**ACTIVIDADES**

**PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN Y DESARROLLO**

**Compostos organotelúricos: estudos cristalográficos, análise conformacional e modelagem molecular das suas interações com cisteíno-proteases. (06/2003 - 05/2007 )**

Título: Compostos organotelúricos: estudos cristalográficos, análise conformacional e modelagem

molecular das suas interações com cisteino-proteases. Processo 02/14194-7. Proyecto realizado en el Laboratorio de Cristalografía, Estereodinámica e Modelagem Molecular - LaCrEMM que tuvo aprobadas dos renovaciones anuales hasta la finalización del período máximo (05/2006) y un año más de trabajo honorario. Paralelamente tuvimos la aprobación de un proyecto del Programa Primeiros Projetos del emprendimiento FAPESP/CNPq, para la compra de equipos computacionales.

40 horas semanales

Departamento de Química, Lab. de Cristalografía, Estereodinámica e Modelagem Molecular - LaCrEMM

Investigación

Coordinador o Responsable

Concluido

Financiación:

Institución del exterior, Apoyo financiero

Institución del exterior, Beca

Equipo: VEGA-TEIJIDO MA (Responsable)

Palabras clave: docking Modelado Molecular telúrio catepsina B cisteino proteasas ab initio

Areas de conocimiento:

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

## **DOCENCIA**

### **Posgraduación en Química (05/1997 - 05/1997 )**

Especialización

Asistente

Asignaturas:

Mini-Curso de Modelagem Molecular (2 semanas) Resp. Margot Paulino, Asist. Mauricio Vega-Teijido., 30 horas, Teórico-Práctico

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química / Estructura de Biomoléculas, Mecánica Molecular, Dinámica Molecular

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

Facultad de Química - UDeLaR

## **VÍNCULOS CON LA INSTITUCIÓN**

### **Becario (01/1995 - 12/1998)**

Ayudante Grado 1, 20 horas semanales

Período en que fuimos alumno de Iniciación Científica y Magister bajo la orientación de la Profa. Dra. Margot Paulino, Cátedra de Química Cuántica.

Escalafón: Docente

Grado: Grado 1

Cargo: Interino

## **ACTIVIDADES**

### **GESTIÓN ACADÉMICA**

#### **Miembro de la Comisión de Magíster (01/1997 - 12/1998 )**

Participación en cogobierno

#### **Miembro del Claústro de la Facultad de Química (representante estudiantil) (01/1998 - 12/1998 )**

Participación en cogobierno

### **CARGA HORARIA**

Carga horaria de docencia: 4 horas

Carga horaria de investigación: 20 horas

Carga horaria de formación RRHH: 16 horas

Carga horaria de extensión: Sin horas

## Producción científica/tecnológica

Mauricio A. Vega-Tejido trabaja actualmente en la Facultad de Química de la Universidad de la República, con una doble actividad científica: 1) junto al Computational Chemistry and Biology Group (coordinado por el Dr. Oscar N. Ventura) y 2) en proyectos de investigación y docencia con el Centro de Bioinformática (coordinado por la Dra. Margot Paulino) ambos laboratorios pertenecientes al Departamento de Experimentación y Teoría de la Estructura de la Materia y sus Aplicaciones-DETEMA.

Desde agosto de 2010 es Investigador Grado 3 de PEDECIBA/Química.

Retornó a Uruguay luego de 11 años en San Pablo, Brasil (Doctorado y Post-doctorado) en julio de 2010 y desde entonces trabaja como Investigador Asociado al CCBG, primero como Honorario y a partir de junio de 2011 como Docente G3 (20hs/sem). Actualmente tiene un cargo de Profesor Adjunto Efectivo (G3) 30/semana. En la Maestría en Bioinformática/PEDECIBA, se desempeña como miembro suplente de la Comisión Académica de Postgraduación y en tareas de docente en el curso de Bioinformática II, en el Taller de Biosimulaciones y en el taller de Diseño de Compuestos Bioactivos, donde participa en la modalidad de docencia presencial, la modalidad de docencia a distancia. Participa activamente en la formación de recursos humanos dado que en los cursos de la maestría los alumnos desarrollan tareas de investigación reales muchas veces relacionadas a sus trabajos de Tesis.

También participa en la implementación técnica de todos los cursos de dicha maestría en la plataforma de educación a distancia (moodle) de Facultad de Química junto a la Lic. Ivana Nuñez. También mantiene participación activa de cooperación científica y en formación de RRHH con su anterior institución, FC-UNESP/Bauru, dando continuidad a las líneas de investigación iniciadas allí. En paralelo, desde marzo de 2011 se desempeña como docente en la Universidad ORT, Uruguay, asociado a las disciplinas Físicoquímica I y II de la Licenciatura en Biotecnología, junto a la Ing. Quím. Guadalupe Martínez. Tiene experiencia en el área de Química Computacional de Biomoléculas e moléculas orgánicas, actuando principalmente en los siguientes temas: docking, Modelado Molecular, Dinámica Molecular y Química Cuántica.

En lo que va de su carrera siempre ha tenido como principal interés la estructura molecular y las interacciones que gobiernan las leyes de la materia. En un intento de tener una visión multidisciplinaria siempre colaboró con especialistas de diversas áreas de la ciencia, sea ella teórica o experimental, y siempre procuró buscar el enfoque teórico más adecuado dentro de las posibilidades y necesidades del estudio, recurriendo a sus colegas cuando su experiencia era escasa en determinado punto de interés. Es por esta razón que, con mucho respeto a los especialistas de cada área teórica, se define como un Modelador Molecular. Desde el punto de vista docente cree que lo que tiene para ofrecer es justamente una visión amplia de interconexión teórico-experimental y así ayudar a experimentalistas a encontrar respuestas y a teóricos a encontrar preguntas.

## Producción bibliográfica

### ARTÍCULOS PUBLICADOS

#### ARBITRADOS

**Purification, structural elucidation, antioxidant capacity and neuroprotective potential of the main polyphenolic compounds contained in *Achyrocline satureioides* (Lam) D.C. (Compositae) (Completo, 2019)**

MARTINEZ MM, F ARREDONDO, GONZALEZ, D., C. ECHEVERRY, VEGA-TEIJIDO MA, D. CARVALHO, Alejandra Rodríguez-Haralambides, RIVERA, F, DAJAS, F., JUAN ANDRES ABIN-CARRIQUIRY

Bioorganic & Medicinal Chemistry, 2019

Palabras clave: flavonoids neuroprotection Achyrocline satureioides HOMO-LUMO Fukui

Áreas de conocimiento:

Ciencias Médicas y de la Salud / Otras Ciencias Médicas / Otras Ciencias Médicas /

Medio de divulgación: Internet

ISSN: 09680896

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.bmc.2019.03.047>

<https://www.sciencedirect.com/journal/bioorganic-and-medicinal-chemistry>

Scopus® WEB OF SCIENCE™

**Theoretical study of the reactions of the hydroselenyl radical (HSe?) with the selenenic radical (HSeO?) (Completo, 2018)**

VEGA-TEIJIDO MA , M. KIENINGER , VENTURA, O.N.  
Journal of Molecular Modeling, v.: 24 3 , 2018  
Palabras clave: MO6 Selenium sulfur radicals  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas /  
Medio de divulgación: Internet  
ISSN: 09485023  
DOI: <https://doi.org/10.1007/s00894-017-3535-1>  
<https://link.springer.com/journal/894>

Scopus'

**An in silico study of the citrus dioxygenases CCD4 family substrates (Completo, 2018)**

VEGA-TEIJIDO MA , Cantero, J. , Rodrigo, MJ. , López, C. , M. PAULINO ZUNINI  
Journal of Biomolecular Structure and Dynamics, v.: 37 8 , 2018  
Palabras clave: carotenoids citrus dioxygenases CCD4  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas /  
Medio de divulgación: Internet  
ISSN: 07391102  
DOI: <https://doi.org/10.1080/07391102.2018.1477619>  
<https://www.tandfonline.com/toc/tbsd20/current>

Scopus' WEB OF SCIENCE™

**Crystallographic and docking (Cathepsins B, K, L and S) studies on bioactive halotelluroxetanes (Completo, 2017)**

Caracelli, I. , Maganhi, SH. , Oliveira Cardoso, J. , Cunha, RLOR. , VEGA-TEIJIDO MA , Zukerman-Schpetor, J. , Tiekink, ERT.  
Zeitschrift für Kristallographie - Crystalline Materials, v.: 233 2 , 2017  
Palabras clave: cathepsin B docking tellurium  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas /  
Medio de divulgación: Internet  
ISSN: 21967105  
DOI: <https://doi.org/10.1515/zkri-2017-2079>  
<https://www.degruyter.com/view/j/zkri>

Scopus'

**A Theoretical Study of CCDa Dioxygenase of Citrus, a Cleavage Enzyme of Carotenoids in Plants (Resumen, 2015)**

VEGA-TEIJIDO MA , PAULINO ZUNINI M. , LÓPEZ C. , RODRIGO M.J.  
Revista Processos Químicos, 9 18, p.:163 - 165, 2015  
Palabras clave: docking Dinámica Molecular carotenoides CCD4  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,  
Electroquímica / Química Computacional  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Ciencias de las Plantas, Botánica /  
Medio de divulgación: Papel  
Lugar de publicación: Brasil  
ISSN: 19818521  
DOI: <http://riquim.fq.edu.uy/archive/files/ec3de5ccd5ff>  
<http://riquim.fq.edu.uy/archive/files/ec3de5ccd5ff16971368550b75877d57.pdf>  
Recently, Rodrigo et al. (2013), reported a series of CCD4-type citrus dioxidasas (CCD4a, CCD4b1, CCD4b2, CCD4c y CCD4d). The enzyme CCD4b1 is the first case described of dioxygenases that cleaves carotenoids C40 in the double bond 7', 8' or 7, 8, generating the corresponding C30 derivative. In this work we report three tridimensional structures of CCD4a, CCD54b1 and CCD4c dioxigenases, modeled by sequence homology and Molecular Dynamics (MD). In addition, we present docking and MD studies performed with CCD4a and carotenoids. All the calculations were performed by means of MOE program with AMBER 99 Force Field and the 2biw (PDB code) structure as template. Docking studies were performed in the CCD4a structure using:  $\beta$ -carotene, zeaxanthin and  $\beta$ -cryptoxanthin; each of them in two initial conformations: the all-trans conformation and the 9-10-cis. Exhaustive docking calculations were performed in CCD4a receptor with thousands of rotated initial conformations in order to find all the possible poses in

the active site. The interaction energy evaluation by means of LondonDG function showed zeaxanthin >  $\beta$ -cryptoxanthin >  $\beta$ -carotene, with mean score values of c.a. -20, -19 and -16 kcal/mol, respectively. For the 9-10-cis series the order was the same, but with values slightly increased to c.a. -21, -19 and -16 kcal/mol, suggesting a slightly better fit of the 9-10-cis conformations. The best complexes obtained for  $\beta$ -carotene were submitted to dynamics simulation in explicit water solvation. These molecular complexes have showed stability in the position of the ligand and an adequate distance between the 7-8-trans double bond and the catalytic Fe(2+) center. The average interaction energies (in kcal/mol) profile was the similar to the docking energies zeaxanthin >  $\beta$ -cryptoxanthin >  $\beta$ -carotene with the values: -126, -110(-107) and -87,  $\beta$ -cryptoxanthin with OH moiety in or out the active site.

**Theoretical insight into the mechanism for the inhibition of the cysteine protease cathepsin B by 1,2,4-thiadiazole derivatives (Completo, 2014)** Trabajo relevante

VEGA-TEIJIDO MA, EL CHAMY MALUF S, BONTURI CR, SAMBRANO JR, VENTURA ON  
Journal of Molecular Modeling, v.: 20 2254, p.:1 - 14, 2014

Palabras clave: docking cathepsina B Química Cuántica tiadiazoles cisteína proteasas

Áreas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

Lugar de publicación: Springer Berlin Heidelberg

ISSN: 09485023

DOI: [10.1007/s00894-014-2254-0](https://doi.org/10.1007/s00894-014-2254-0)

<http://link.springer.com/article/10.1007/s00894-014-2254-0?no-access=true>

Abstract Several cellular disorders have been related to the overexpression of the cysteine protease cathepsin B (CatB), such as rheumatic arthritis, muscular dystrophy, osteoporosis, Alzheimers disease, and tumor metastasis. Therefore, inhibiting CatB may be a way to control unregulated cellular functions and prevent tissue malformations. The inhibitory action of 1,2,4-thiadiazole (TDZ) derivatives has been associated in the literature with their ability to form disulfide bridges with the catalytic cysteine of CatB. In this work, we present molecular modeling and docking studies of a series of eight 1,2,4-thiadiazole compounds. Substitutions at two positions (3 and 5) on the 1,2,4-thiadiazole ring were analyzed, and the docking scores were correlated to experimental data. A correlation was found with the sequence of scores of four related compounds with different substituents at position 5. No correlation was observed for changes at position 3. In addition, quantum chemistry calculations were performed on smaller molecular models to study the mechanism of inhibition of TDZ at the active site of CatB. All possible protonation states of the ligand and the active site residues were assessed. The tautomeric form in which the proton is located on N2 was identified as the species that has the structural and energetic characteristics that would allow the ring opening of 1,2,4-thiadiazole.

Scopus

**A tellurium-based cathepsin B inhibitor: molecular structure and modeling, molecular docking, and biological evaluation (Completo, 2012)** Trabajo relevante

CARACELLI, I., VEGA-TEIJIDO MA, ZUKERMAN-SCHPECTOR, J., CESARI, M.H.S., LOPES, J.G.S., JULIANO, L., SANTOS, P.S., COMASSETO, J.V., CUNHA, R.L.O.R., TIEKINK, E.R.T.

Journal of Molecular Structure, v.: 1013 p.:11 - 18, 2012

Palabras clave: docking Quantum Chemistry tellurium cathepsin B

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Desarrollo de inhibidores organotelúricos de cisteína proteasas

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 00222860

DOI: [10.1016/j.molstruc.2012.01.008](https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2012.01.008)

<http://dx.doi.org/10.1016/j.molstruc.2012.01.008>

Joint first authors: Caracelli & Vega.(2 Primeros Autores)\*\* Trabajo Multidisciplinario experimental-teórico: síntesis, cristalografía, espectroscopía Raman, Química Cuántica, modelado molecular, docking y finalmente evaluación de capacidad inhibitoria de cathepsina B.\*\* ABSTRACT: The second-order rate constant for the inhibition of the cysteine protease cathepsin B (Cat B) by 4,4-dichloro-1,3-diphenyl-4-telluraoct-2-en-1-one, 3, is significantly greater than that observed for analogs. In the crystal structure of 3, the coordination geometry for Te is based on a distorted pentagonal bipyramidal geometry wherein the axial positions are occupied by butyl-carbon and carbonyl-oxygen atoms, and the equatorial plane by vinyl-carbon, two covalently bound chlorides, a stereochemically active lone pair of electrons and a third chloride derived from a symmetry related

molecule. Raman and molecular modeling studies indicate the persistence of the intramolecular axial TeO(carbonyl) interaction. Docking studies of 3 with Cat B reveals a change in the configuration about the vinyl C=C bond which changes to E from Z as observed in the crystal structure. This isomerism allows optimization of interatomic interactions in the complex which, in common with other docking studies, features a covalent Te-SGCys29 bond. Pivotaly the E configuration allows for the formation of a hypervalent Te...O interaction and an O...H-O hydrogen bond with the Gly27 and Glu122 residues of Cat B, respectively. Additional stabilization is afforded by a combination of interactions spanning the sub-sites of Cat B. The greater inhibitory activity of 3 compared with analogs is rationalized by the additional interactions formed between 3 and the His110 and His111 residues of the occluding loop, thus almost closing the entrance to the active site.

Scopus' WEB OF SCIENCE™

**ChemInform Abstract: Two Intermediates in the Synthesis of Decahydroisoquinolines with NMDA and AMPA Receptor Antagonist Activity (Resumen, 2010)**

ZUKERMAN SCHPECTOR J , VEGA-TEIJIDO MA , CARACELLI I , DIAS LC , FERNANDES AMAP  
Acta Crystallographica Section C-Crystal Structure Communications, v.: 33 1 , p.:159 - 159, 2010  
Palabras clave: cristalografía

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Internet

Lugar de publicación: WILEY-VCH Verlag GmbH & Co

ISSN: 01082701

DOI: [10.1002/chin.200201022](https://doi.org/10.1002/chin.200201022)

<http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/chin.200201022/abstract>

Artículo original de 2001, seleccionado para ser reeditado y publicado su resumen electrónicamente.

Scopus' WEB OF SCIENCE™

**Structure characterization of molecular complexes for non-linear optical materials. II. 1 : 1 complexes of 4-methyl-morpholine-N-oxide (1) and 3-picoline-N-oxide (2) with 2,4,6-trinitrophenol, studied by X-ray, AM1 and DFT calculations. (Completo, 2007)**

ZUKERMAN-SCHPECTOR, J. , VEGA-TEIJIDO MA , CARVALHO, C.C. , ISOLANI, P.C. ,  
CARACELLI, I.

Zeitschrift für Kristallographie, v.: 22 p.:427 - 431, 2007

Palabras clave: Química Cuántica

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

Lugar de publicación: Alemania

ISSN: 00442968

DOI: [10.1524/zkri.2007.222.8.427](https://doi.org/10.1524/zkri.2007.222.8.427)

Scopus' WEB OF SCIENCE™

**Crystal and molecular structures of 4-substituted 3,4-dihydropyrimidin-2(1H)-ones studied by X-ray and AM1 and B3LYP calculations. (Completo, 2007)**

VEGA-TEIJIDO MA , ZUKERMAN-SCHPECTOR, J. , NUNES, F. M. , GATTI, P. M. , STEFANI, H. A. ,  
CARACELLI, I.

Zeitschrift für Kristallographie, v.: 222 p.:705 - 712, 2007

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 00442968

DOI: [10.1524/zkri.2007.222.12.705](https://doi.org/10.1524/zkri.2007.222.12.705)

<http://www.oldenbourg-wissenschaftsverlag.de/olb/de/1.c.335325.de>

Scopus' WEB OF SCIENCE™

**Conformational analyses and docking studies of a series of 5-nitrofurans and 5-nitrothiophen-  
semicarbazone derivatives in three possible binding sites of trypanothione and glutathione  
reductases. (Completo, 2006)**

Trabajo relevante

VEGA-TEIJIDO MA, CARACELLI, I., ZUKERMAN-SCHPECTOR, J.

Journal of molecular graphics & modelling, v.: 24 p.:349 - 355, 2006

Palabras clave: docking nitrofuranos

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química / cristalografía, docking y Modelado Molecular

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 10933263

DOI: [10.1016/j.jmngm.2005.09.008](https://doi.org/10.1016/j.jmngm.2005.09.008)

<http://www.elsevier.com/locate/jmngm>

Scopus® WEB OF SCIENCE™

**Synthesis, crystal structure and theoretical studies of aryltellurenyltetramethylthiourea(tmtu)iodine complexes: Ph-Te(tmtu)I (1) and b-naphtyl-Te(tmtu)I (2). (Completo, 2006)**

SHULZ LANG, E., LEDESMA, G., ABRAM, U., VEGA-TEIJIDO MA, CARACELLI, I., ZUKERMAN-SCHPECTOR, J.

Zeitschrift für Kristallographie, v.: 221 p.:166 - 172, 2006

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 00442968

DOI: [10.1524/zkri.2006.221.2.166](https://doi.org/10.1524/zkri.2006.221.2.166)

<http://www.oldenbourg.de>

Scopus® WEB OF SCIENCE™

**Molecular structure of two C-aryl-iminocyclitols studied by X-ray and ab initio calculations (Completo, 2005)**

ZUKERMAN-SCHPECTOR, J., CARACELLI, I., VEGA-TEIJIDO MA, GARCÍA, A.L.L., COSTENARO, E.R., CORREIA, C.R.D.

Zeitschrift für Kristallographie, v.: 220 p.:45 - 49, 2005

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 00442968

DOI: [10.1524/zkri.220.1.45.58888](https://doi.org/10.1524/zkri.220.1.45.58888)

<http://www.oldenbourg-wissenschaftsverlag.de>

Scopus® WEB OF SCIENCE™

**Dichloro(cyclohexilidene-1-methylene)(phenyl)Te(IV). Looking for the theoretical treatment. (Completo, 2004)** Trabajo relevante

VEGA-TEIJIDO MA, ZUKERMAN-SCHPECTOR, J., VENTURA, O.N., CAMILLO, R. L., CARACELLI, I., GUADAGNIN, R.C., BRAGA, A.L., SILVEIRA, C.C.

Zeitschrift für Kristallographie, v.: 219 p.:652 - 658, 2004

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 00442968

DOI: [10.1524/zkri.219.10.652.50816](https://doi.org/10.1524/zkri.219.10.652.50816)

<http://www.oldenbourg-wissenschaftsverlag.de/olb/de/1.c.335324.de>

Scopus® WEB OF SCIENCE™

**Dichloro [(E)-2-chloro-1-vinyl-cyclohexanol][(4-methoxy-phenyl)Te(IV). A case of conformational polymorphism. (Completo, 2003)**

VEGA-TEIJIDO MA, ZUKERMAN-SCHPECTOR, J., CAMILLO, R. L., CARACELLI, I., STEFANI, H. A., CHIEFFI, A.E., COMASSETO, J.V.

Zeitschrift für Kristallographie, v.: 218 p.:636 - 641, 2003

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel



ISSN: 00442968

DOI: [10.1524/zkri.218.9.636.20679](https://doi.org/10.1524/zkri.218.9.636.20679)

<http://www.oldenbourg-wissenschaftsverlag.de/olb/de/1.c.335324.de>

Scopus® WEB OF SCIENCE™

**Structure characterization of molecular complexes for non-linear optical materials. X-ray analysis and AM1 calculations of 1:1 complexes of 8-hydroxyquinoline (1) and isonicotinamide (2) with 2,4,6-trinitrophenol. (Completo, 2003)**

CARVALHO, C.C., CAMARGO, A.J., VEGA-TEIJIDO MA, ISOLANI, P.C., VICENTINI, G., ZUKERMAN-SCHPECTOR, J.

Zeitschrift für Kristallographie, v.: 218 p.:575 - 580, 2003

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 00442968

DOI: [10.1524/zkri.218.8.575.20683](https://doi.org/10.1524/zkri.218.8.575.20683)

<http://www.oldenbourg-wissenschaftsverlag.de/olb/de/1.c.335324.de>

Scopus® WEB OF SCIENCE™

**Modelling CreA protein-DNA recognition determinants. A molecular dynamics study of fully charged CreA-DNA model in water. (Completo, 2002)**

PAULINO, M., ESPERON, P., VEGA-TEIJIDO MA, SCAZZOCCHIO, C., TAPIA, O.

Journal of Molecular Structure Theochem, v.: 580 p.:225 - 242, 2002

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 01661280

DOI: [10.1016/S0166-1280\(01\)00619-4](https://doi.org/10.1016/S0166-1280(01)00619-4)

Scopus® WEB OF SCIENCE™

**Computer assisted design of potentially active anti-trypanosomal compounds (Completo, 2002)**

PAULINO, M., IRIBARNE, F., HANSZ, M., VEGA-TEIJIDO MA, SEOANE, G., CERECETTO, H., DI MAIO, R., CARACELLI, I., ZUKERMAN-SCHPECTOR, J., OLEA, C., STOPPANI, A.O.M., BERRIMAN, M., FAIRLAMB, A.H., TAPIA, O.

Journal of Molecular Structure Theochem, v.: 584 p.:95 - 105, 2002

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica /

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 01661280

DOI: [10.1016/S0166-1280\(02\)00009-X](https://doi.org/10.1016/S0166-1280(02)00009-X)

Scopus® WEB OF SCIENCE™

**Crystal structure of 4-aza-2-(hydroxyimino)-3-methyl-5-(2-pyridyl)pent-3-ene, C<sub>10</sub>H<sub>13</sub>N<sub>3</sub>O (Completo, 2001)**

IULEK, J., ZUKERMAN-SCHPECTOR, J., STADLER, C.C., TOZETTO, A., VEGA-TEIJIDO MA

Zeitschrift Für Kristallographie-New Crystal Structures, v.: 216 p.:585 - 586, 2001

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 14337266

Scopus® WEB OF SCIENCE™

**Two intermediates in the synthesis of decahydroisoquinolines with NMDA and AMPA receptor antagonist activity (Completo, 2001)**

ZUKERMAN-SCHPECTOR, J., VEGA-TEIJIDO MA, CARACELLI, I., DIAZ, L.C., FERNANDES, A.M.A.P.

Acta Crystallographica Section C-Crystal Structure Communications, v.: 57 9, p.:1089 - 1091, 2001

Areas de conocimiento:

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

y Química Cuántica  
Medio de divulgación: Papel  
ISSN: 01082701

Scopus® WEB OF SCIENCE™

**Two polycyclic compounds derived from a Diels-Alder reaction (Completo, 2001)**

ZUKERMAN-SCHPECTOR, J., CARACELLI, I., VEGA-TEIJIDO MA, CONSTATINO, M.G.,  
BEATRIZ, A., DA SILVA, G.V.

Acta Crystallographica Section C-Crystal Structure Communications, v.: 57 6, p.:646 - 648, 2001

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 01082701

Scopus® WEB OF SCIENCE™

**Modelling a 3D structure for EgDf1 from Echinococcus granulosus: putative epitopes, phosphorylation motifs and ligand. (Completo, 1998)**

PAULINO, M., ESTEVES, A., VEGA-TEIJIDO MA, TAVARES, G., EHRLICH, R., TAPIA, O.

Journal of Computer-Aided Molecular Design, v.: 12 p.:351 - 360, 1998

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 0920654X

Scopus® WEB OF SCIENCE™

**LIBROS**

**Introducción a los métodos y equipos analíticos en biotecnología ( Participación ,  
2013) Trabajo relevante**

VEGA-TEIJIDO MA

Edición: ,

Editorial: Ediciones Universidad ORT Uruguay, Montevideo, Uruguay

En prensa

Palabras clave: biotecnología

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Métodos de Investigación en Bioquímica /  
métodos espectroscópicos

Medio de divulgación: Papel

ISSN/ISBN:

Se trata de un libro especializado en ofrecer las bases teóricas y prácticas de los métodos analíticos  
usados en biotecnología. Esta iniciativa se focaliza en reunir en un único texto una variedad de  
métodos analíticos y así facilitar el acceso a la información. Los usuarios/diana de este libro son los  
estudiantes de graduación y postgraduación de las carreras de biotecnología, bioquímica y química.

Capítulos:

Ondas electromagnética y fluorescencia

Organizadores: Lorena Betancor y Carlos Sanguinetti

Página inicial , Página final

**Traducción al Castellano del libro «Gestión de la Cadena de Suministros" de los autores Silvio R.I. Pires  
y Luis E. Carretero Díaz ( Libro publicado Texto integral , 2007)**

VEGA-TEIJIDO MA , PIREZ LUZARDO, M.D.

Edición: ,

Editorial: McGraw-Hill/Interamericana de España, S.A.U, Madrid, España.

Palabras clave: Ingeniería de Producción

Areas de conocimiento:

Ingeniería y Tecnología / Otras Ingenierías y Tecnologías / Otras Ingenierías y Tecnologías /  
Ingeniería de Producción

Medio de divulgación: Papel

ISSN/ISBN:

<http://www.amazon.co.uk/Gesti%C3%B3n-cadena-suministros-Spanish-Edition->

ebook/dp/B0096R8RCG

A inicios de 2007, junto con Maira D. Pérez Luzardo fuimos contratados por el Prof. Silvio R.I. Pires y a pedido del propio autor realizamos la traducción de su libro *Gestão da Cadeia de Suprimentos* originalmente editado en portugués por la editora Atlas, SP, Brasil, para que fuera editado en Madrid, España por la editora McGraw-Hill/Interamericana de España, S.A.U., bajo el título *Gestión de la Cadena de Suministros* en coautoría entre el Prof. Silvio R.I. Pires y el Prof. Luis E. Carretero Díaz.

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

### **Modelado y Fluorescencia de colorantes tipo BODIPY con Cl, Se y Te. (2019)**

Resumen

VEGA-TEIJIDO MA , Lucía Suárez Cuitiño

Evento: Nacional

Descripción: 6to Encuentro Nacional de Química - ENAQUI6

Ciudad: Montevideo

Año del evento: 2019

Publicación arbitrada

Palabras clave: BODIPY Selenio Telúrio

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Otros

<https://sites.google.com/view/enaqui6/p%C3%A1gina-principal/posters>

El compuesto 4,4-difluoro-4-bora-3a,4a-diaza-s-indaceno (BODIPY) fue reportado por primera vez en 1968 [1]. Al igual que la mayoría de sus derivados presenta una fluorescencia relativamente intensa, y por esta razón, esta familia de compuestos ha sido utilizada como colorantes de lasers, quimiosensores y sondas fluorescentes en sistemas biológicos [1,2]. Fron et al. (2009) [2] reportó una serie de derivados de BODIPY usando como Cl, Se, Te, O y S. Esta serie de compuestos se tomó como punto de partida para los trabajos de modelado y de estudio químico-cuántico de sus propiedades estructurales, electrónicas y de fluorescencia que estamos abordando en este trabajo.

### **Influence of Alpha Helices in the Membrane Interaction of Carotenoid Cleavage Dioxygenases CCD4 Family Substrates in Citrus. (2018)**

Resumen

Cantero, J. , VEGA-TEIJIDO MA , Rodrigo, MJ. , M. PAULINO ZUNINI

Descripción: XLIV Congress of Theoretical Chemists of the Latin Expression QUITEL

Ciudad: Santiago de Chile

Año del evento: 2018

Anales/Proceedings: XLIV Congress of Theoretical Chemists of the Latin Expression QUITEL

Publicación arbitrada

Palabras clave: carotenoids dioxygenases CCD4

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas /

Medio de divulgación: Internet

Financiación/Cooperación:

Facultad de Química - UDeLaR / Otra, Uruguay

<http://www.sbbmch.cl/?p=17756&lang=en>

### **From the Genome to the Proteome: In Silico Strategies to Pave the Way for the Discovery of New Drugs. (2018)**

Resumen

M. PAULINO ZUNINI , VEGA-TEIJIDO MA

Descripción: XLIV Congress of Theoretical Chemists of the Latin Expression QUITEL

Ciudad: Santiago de Chile

Año del evento: 2018

Anales/Proceedings: XLIV Congress of Theoretical Chemists of the Latin Expression QUITEL

Publicación arbitrada

Escrita por invitación

Palabras clave: Bioinformatics drug design molecular dynamics docking

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas /  
Medio de divulgación: Internet  
Financiación/Cooperación:  
Facultad de Química - UDeLaR / Otra, Uruguay  
<http://www.sbbmch.cl/?p=17756&lang=en>

**Influence of Alpha Helices in the Membrane Interaction of Carotenoid Cleavage Dioxygenases CCD4 Family Substrates in Citrus. (2018)**

Resumen

VEGA-TEIJIDO MA , Cantero, J. , Rodrigo, MJ. , M. PAULINO ZUNINI

Evento: Nacional

Descripción: Primer Encuentro Bienal de la Sociedad de Bioquímica y Biología Molecular

Ciudad: Montevideo

Año del evento: 2018

Anales/Proceedings: Primer Encuentro Bienal de la Sociedad de Bioquímica y Biología Molecular

Publicación arbitrada

Palabras clave: Carotenoids dioxygenases CCD4

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas /

Medio de divulgación: Internet

Financiación/Cooperación:

Facultad de Química - UDeLaR / Otra, Uruguay

<https://www.sbbm.edu.uy/>

**CCSD(T), composite ab initio and dispersion-corrected DFT studies of reactions of sulfinyl and thiyl radicals and anions. (2017)**

Resumen

M. KIENINGER , VEGA-TEIJIDO MA , VENTURA, O.N.

Evento: Internacional

Descripción: XLIII Congress of Theoretical Chemists of Latin Expression

Ciudad: Paris

Año del evento: 2017

Anales/Proceedings: XLIII Congress of Theoretical Chemists of Latin Expression

Publicación arbitrada

Palabras clave: CCSD(T) Sulfur radicals

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas /

Medio de divulgación: Internet

Financiación/Cooperación:

Facultad de Química - UDeLaR / Otra, Uruguay

<https://chitelparis2017.sciencesconf.org/resource/page?id=16&forward-action=page&forward-controller=>

**Mecanismo de reacción de los radicales hidroselenil (HSe.) y selenénico (HSeO.) (2017)**

Resumen

VEGA-TEIJIDO MA , M. KIENINGER , VENTURA, O.N.

Evento: Regional

Descripción: 5to Encuentro Nacional de Química-ENAQUI

Ciudad: Montevideo

Año del evento: 2017

Anales/Proceedings: 5to Encuentro Nacional de Química-ENAQUI

Publicación arbitrada

Palabras clave: CCSD(T) MO6 Selenium

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas /

Medio de divulgación: Internet

Financiación/Cooperación:

Facultad de Química - UDeLaR / Otra, Uruguay

**A theoretical study of Carotenoid Cleavage Dioxygenases CCD4 family substrates in Citrus (2016)**

Resumen

PAULINO, MARGOT , VEGA-TEIJIDO MA , JORGE CANTERO , JOANNA LADO , MARÍA J. RODRIGO

Evento: Internacional

Descripción: QUITEL 2016, 42nd International Congress of Theoretical Chemists of Latin Expression

Ciudad: Montevideo

Año del evento: 2016

Anales/Proceedings: Proceedings of QUITEL 2016, 42nd International Congress of Theoretical Chemists of Latin Expression

Publicación arbitrada

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Ciencias de las Plantas, Botánica /

Medio de divulgación: Internet

ARTICULO YA ENVIADO al Journal of Molecular Modeling (Springer) con el título: An In Silico Study of the Dioxygenases CCD4 family Substrates in Citrus. Margot Paulino Zunini\*<sup>a</sup> Mauricio Vega Teijido\*<sup>a,b</sup>, Jorge Cantero<sup>a,c</sup>, Carolina López<sup>a</sup> and Maria J. Rodrigo\*<sup>d</sup>. Abstract The coloration in citrus is due the accumulation of carotenoids, which are isoprenoid pigments of 40 carbon atoms (C40) with a high conformational flexibility. Recently, Rodrigo et al. (2013), reported a series of CCD4-type citrus dioxygenases involved in the generation of C30 apocarotenoids which provide an attractive reddish-orange pigmentation to the peel of many sweet oranges and mandarins. Among them, CCD4b1 was the first case described of a dioxygenase that cleaves carotenoids C40 in the double bond 7', 8' or 7, 8, generating the corresponding C30 derivative ( $\beta$ -citraurin and 8- $\beta$ -apocarotenal). Here we report three new tridimensional structures of dioxygenases of the citrus CCD4 family. The structures were modeled by sequence homology (2biw, PDB code Kloer et al. 2005) and Molecular Dynamics (MD). Docking calculations were performed in CCD4a receptors with thousands of rotated initial conformations, in order to find all the possible poses in the active site. The evaluation of the interaction energy was done by means of ASE scoring posing, Amber99 refinement and LondonDG rescoring. For the case of CCD4a. model, the results shown LondonDG score of -19, -17 and -15 kcal/mol, respectively for zeaxanthin,  $\beta$ -cryptoxanthin and  $\beta$ -carotene, respectively. The same sequence in the estimated interaction strength for the three ligands was obtained using MD. In the case of CCD4b1 the interaction energy indicated that, in agreement with experimental data, zeaxanthin (Fig. 1) and  $\beta$ -cryptoxanthin could be catalysed by the enzyme besides lycopene has not a good interaction energy to predict it as a good substrate and that  $\beta$ - and  $\alpha$ -carotene have chances to be oxidized by CCD4b1. These findings will be discussed considering the potential in vivo substrates and products, and the physiological role in citrus fruits.

#### **Mechanistic study of the reaction of HSeO and HSe radicals. (2016)**

Resumen

VEGA-TEIJIDO MA , OSCAR N. VENTURA

Evento: Internacional

Descripción: QUITEL 2016, 42nd International Congress of Theoretical Chemists of Latin Expression

Ciudad: Montevideo

Año del evento: 2016

Anales/Proceedings: Proceedings of QUITEL 2016, 42nd International Congress of Theoretical Chemists of Latin Expression

Publicación arbitrada

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Internet

ARTICULO YA ENVIADO al Journal of Molecular Modeling (Springer) para publicación con el título: Theoretical studies of the reactions of hydroselenyl (HSe●) and selenenic (HSeO●) radicals and comparison to the sulfur analogues. Mauricio Angel Vega-Teijido\*, Martina Kieninger and Oscar N. Ventura. Abstract Selenium species formed in some biological processes involve ionic and radical intermediates such as RSe●, RSe<sup>-</sup>, RSeO●, RSeO<sup>-</sup> and others. In this work we present a theoretical study of the mechanism of reaction of the simplest radicals, hydroselenyl (HSe●) and seleneni (HSeO●) moieties, investigating the possible products, intermediates and transition state structures. The Density Functional Theory (DFT) with B3LYP/6-311++G(3df,3pd) and "Ahlich coulomb fitting" basis sets with an electronic core potential (ECP) for both Se atoms were used. The same procedure was used for the calculation of the electronic density. All calculations were repeated also using the M06- 2X DFT method, which exhibits a better description of weaker bonds

than B3LYP. The process can be described as an initial formation of the so called CR complex (HSeSeOH) from which a Cis-HSeSeOH product is obtained after surmounting the TS1 transition state. A lower barrier is necessary to overcome a TS5 transition state to obtain the trans-HseSeOH species. CR can also rearrange to the IN3 intermediate overcoming the barrier presented by the TS3 transition state. Further decomposition of IN3 through a TS4 transition state is possible, to obtain H2O and 1S2. A second possible conversion of IN3 was observed, to one of the HSeSeOH species through two pathways (with transition states TS3-1 and TS3-2). A comparison of some of the results with the sulfur analogues on the same pathways is also presented in this work.

#### **Modelado de complejos Receptor- Ligando a través de métodos de Docking (2015)**

Resumen expandido  
VEGA-TEIJIDO MA

Evento: Internacional

Descripción: Regional Workshop in Structural Bioinformatics

Ciudad: Montevideo

Año del evento: 2015

Anales/Proceedings: Regional Workshop in Structural Bioinformatics

Palabras clave: docking

Áreas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Otros

Conferencia invitada sobre metodología general de docking molecular. El workshop contó con la presencia de conferencistas invitados y participantes de varios países sudamericanos, docentes y estudiantes de postgraduación.

#### **A theoretical study of CCD4a dioxygenase of citrus, a cleavage enzyme of carotenoids in plants. SBQT 2015 (2015)**

Resumen  
VEGA-TEIJIDO MA

Evento: Internacional

Descripción: Seminario Internacional: Fitoquímicos en Agroalimentación y Salud

Ciudad: Montevideo

Año del evento: 2015

Anales/Proceedings: Evento organizado por CYTED (Cornucopia, Ibercarot)

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Ciencias de las Plantas, Botánica /

Medio de divulgación: Otros

Participación con presentación de poster durante el evento.

#### **Estudio computacional del mecanismo de la metionina sulfóxido reductasa A (MsrA) (2015)**

Resumen  
VEGA-TEIJIDO MA, VENTURA O.N.

Evento: Nacional

Descripción: Cuarto Encuentro Nacional de Química ENAQUI4

Ciudad: Montevideo

Año del evento: 2015

Anales/Proceedings: Libro de Resúmenes

Publicación arbitrada

Áreas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: CD-Rom

#### **A Theoretical Study of CCD4a Dioxygenase of Citrus, a Cleavage Enzyme of Carotenoids in Plants. (IBERCAROT) (2015)**

Resumen expandido  
VEGA-TEIJIDO MA, PAULINO ZUNINI M., LÓPEZ C., RODRIGO M.J.

Evento: Internacional

Descripción: XVIII Simpósio Brasileiro de Química Teórica

Ciudad: Pirenópolis, GO, Brasil  
Año del evento: 2015  
Anales/Proceedings: Livro de Resumos  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Ciencias de las Plantas, Botánica /  
Medio de divulgación: CD-Rom

**Theoretical study of the inhibition mechanism of 1,2,4-thiadiazole derivatives in the cysteine protease cathepsin B (CatB). (2014)**

Resumen  
VEGA-TEIJIDO MA , EL CHAMY MALUF S. , BONTURI C.R. , SAMBRANO J.R. , VENTURA O.N.

Evento: Internacional  
Descripción: 10th Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists WATOC 2014, 5-10 October 2014.  
Ciudad: Santiago de Chile, Chile  
Año del evento: 2014  
Anales/Proceedings: Abstract Book  
Publicación arbitrada  
Palabras clave: docking cathepsin B  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica /  
Medio de divulgación: Internet

**Modeling, Docking and Molecular Dynamics studies of CCD4a with three carotenoids substrates. (2014)**

Resumen  
VEGA-TEIJIDO MA , PAULINO ZUNINI M. , LÓPEZ C. , RODRIGO M.J.

Evento: Internacional  
Descripción: 10th Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists WATOC 2014, 5-10 October 2014.  
Ciudad: Santiago de Chile, Chile  
Año del evento: 2014  
Anales/Proceedings: Abstract Book  
Publicación arbitrada  
Palabras clave: docking molecular dynamics  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica /  
Medio de divulgación: Internet

**Inibição da Catepsina B por 2,2-dipiridil disulfeto (2-tp-A) (2013)**

Resumen  
BONTURI, C. , EL CHAMY MALUF, S. , VEGA-TEIJIDO MA , SAMBRANO, J.R.

Evento: Nacional  
Descripción: Décimo Primeiro Congresso Aberto aos Estudantes de Biologia - XI CAEB  
Ciudad: Campinas, SP, Brasil.  
Año del evento: 2013  
Anales/Proceedings: Décimo Primeiro Congresso Aberto aos Estudantes de Biologia - XI CAEB  
Editorial: Organizadores del Décimo Primeiro Congresso Aberto aos Estudantes de Biologia - XI CAEB  
Palabras clave: Química Computacional  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / modelado molecular  
Medio de divulgación: Papel

**Estudios in silico de la interacción de BCO1 con carotenoides de origen vegetal (2013)**

Resumen  
RODRIGUEZ, R. , PAULINO, M. , PAZOS, E. , VEGA-TEIJIDO MA , MELENDEZ, A.

Evento: Nacional  
Descripción: Segundas Jornadas de +Biofísica SBF.uy-SUB  
Ciudad: Montevideo, Uruguay.  
Año del evento: 2013  
Anales/Proceedings: Segundas Jornadas de +Biofísica SBF.uy-SUB  
Editorial: Organizadores de las Segundas Jornadas de +Biofísica SBF.uy-SUB  
Palabras clave: docking  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,  
Electroquímica / modelado molecular  
Medio de divulgación: Papel

#### **Modelado por Homología, Anclaje y Dinámica Molecular de tres Dioxigenasas de Rotura de Carotenoides de Cítricos de la Subfamilia CCD4 (2013)**

Resumen

VEGA-TEIJIDO MA, LOPEZ, C., RODRIGO, M.J., PAULINO, M.

Evento: Nacional  
Descripción: Segundas Jornadas de +Biofísica SBF.uy-SUB  
Ciudad: Montevideo, Uruguay.  
Año del evento: 2013  
Anales/Proceedings: Segundas Jornadas de +Biofísica SBF.uy-SUB  
Editorial: Organizadores de las Segundas Jornadas de +Biofísica SBF.uy-SUB  
Palabras clave: docking  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,  
Electroquímica / modelado molecular  
Medio de divulgación: Papel

La coloración externa e interna de los frutos cítricos es uno de los mayores atributos de calidad comercial y organoléptica. Esta coloración es debida a la acumulación de carotenoides, pigmentos isoprenoides de 40 carbonos (C40), y sus derivados. En particular, en la piel de los cítricos existe una importante presencia de apocarotenoides de 30 carbonos (C30) que les confiere una intensa pigmentación naranja. Recientemente, Rodrigo et al.,<sup>1</sup> reportaron la caracterización molecular y bioquímica de CCD4b1 de cítricos, junto con un primer modelo de dicha enzima. CCD4b1 es la primera dioxigenasa descrita que fragmenta carotenoides C40 (beta-caroteno, zeaxantina y beta-criptoxantina) en el doble enlace 7, 8 ó 7, 8 para generar los correspondientes C30, responsables de la intensa coloración anaranjada de algunas variedades de cítricos. Adicionalmente, en cítricos se han identificado otras dioxigenasas de la subfamilia CCD4 cuya funcionalidad y/o afinidad por los diferentes carotenoides se desconoce<sup>[1]</sup>. En este estudio son presentados los modelos construidos por homología de 2 de 3 dioxigenasas de carotenoides de cítricos de la subfamilia CCD4: CCD4a, CCD4b1 y CCD4c (Figura 1). Utilizando el programa MOE<sup>[2]</sup> versión 2009.10, estas estructuras fueron modeladas a partir de la estructura de código PDB 2biw<sup>[3]</sup>, una dioxigenasa de maíz, y optimizadas por minimización de energía y Dinámica Molecular (DM) con el ligando de la estructura referencia. Actualmente están siendo estudiadas mediante Anclaje Molecular y DM con los posibles sustratos de estas enzimas. [1] Rodrigo, M.J., et al. Journal of Experimental Botany doi:10.1093/jxb/ert260, 2013. [2] MOE. Molecular Operating Environment (MOE 2007.09), Chemical Computing Group, Montreal, Quebec, Canada. [3] Kloer, D.P. et al Science. 308, 267, 2005.

#### **Estudios de docking y reactividad de derivados de 2-tiopiridina (2-tp) en catepsina B (CatB) (2013)**

Resumen

VEGA-TEIJIDO MA, BONTURI, C., EL CHAMY MALUF, S., SAMBRANO, J.R., VENTURA, O.N.

Evento: Nacional  
Descripción: 3er Encuentro Nacional de Ciencias Químicas-ENAQUI 3.0  
Ciudad: Montevideo, Uruguay.  
Año del evento: 2013  
Anales/Proceedings: 3er Encuentro Nacional de Ciencias Químicas-ENAQUI 3.0  
Editorial: Organizadores del 3er Encuentro Nacional de Ciencias Químicas-ENAQUI 3.0  
Palabras clave: Química Computacional  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,  
Electroquímica / modelado molecular  
Medio de divulgación: Internet



La catepsina B (CatB) es una cisteína proteasa humana de la superfamilia de la papaína que actúa en proteólisis y activación de otras proteasas. Su sobreactividad ha sido asociada a diversas patologías[1] como enfermedad de Alzheimer, esclerosis múltiple y cáncer. Los derivados de 2-tiopiridina inhiben covalentemente las cisteína proteasas[2]. En este trabajo presentamos un estudio mediante docking[3] de una serie de 6 compuestos (A-F) y cálculos DFT usando B3LYP/6-31+G\*\* para estudiar la reactividad y selectividad por CatB. Los resultados de docking de la serie muestran un score de unión aumentando en correlación con el tamaño del ligando (con valores entre 37,78 y 77,68 kcal/mol). Para los 3 ligandos mayores (D, E y F) se observa un mejor ajuste al sitio activo y una menor distancia (3,02 - 3,96Å) entre el S de la Cys29 y el S del ligando que reaccionará covalentemente. Los cálculos cuánticos de optimización de sistemas menores (modelados del sistema completo) evidenciaron la necesidad de que un N del ligando inicialmente se protona a expensas de la His199 para poder ser blanco del ataque nucleofílico del tiolato de la Cys29. En todos los casos se protona el N de R3 (en A un anillo 2-piridil). Estos resultados son una base para la comprensión de las características químicas y estructurales que pueden guiar el modelado y optimización de ligandos derivados de 2-tiopiridina como inhibidores de CatB y otras proteasas. [1] Lecaillie, F. et al. Chem. Rev. 2002 102 12:4459-4488. [2] Otto, H. H. & Schirmeister, T. Chem. Rev. 1997 97: 133-171. [3] Programa GOLD: <http://www.ccdc.cam.ac.uk/Solutions/GoldSuite/Pages/GOLD.aspx>

### **A theoretical study of cysteine protease inhibition by 1,2,4 thiazole derivatives (2012)**

Resumen

EL CHAMY MALUF, S., VEGA-TEIJIDO MA, BONTURI, C., VENTURA, O.N., SAMBRANO, J.R.

Evento: Internacional

Descripción: Advanced Topics in Computational Biology - Agrochemical & Drug Design

Ciudad: Campinas, SP, Brasil.

Año del evento: 2012

Anales/Proceedings: Advanced Topics in Computational Biology - Agrochemical & Drug Design

Editorial: Organizadores de Advanced Topics in Computational Biology - Agrochemical & Drug Design

Palabras clave: docking

Areas de conocimiento:

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

Electroquímica / modelado molecular

Medio de divulgación: CD-Rom

### **Estudo teórico da inibição de uma cisteíno-protease por ligantes derivados do 1,2,4-tiadiazol (2012)**

Resumen

EL CHAMY MALUF, S., VEGA-TEIJIDO MA, BONTURI, C., SAMBRANO, J.R., VENTURA, O.N.

Evento: Internacional

Descripción: XXXVIII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina-Quitel

Ciudad: Natal, RN, Brasil.

Año del evento: 2012

Anales/Proceedings: XXXVIII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina-Quitel

Editorial: Organizadores del XXXVIII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina-Quitel

Palabras clave: docking

Areas de conocimiento:

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

Electroquímica / modelado molecular

Medio de divulgación: CD-Rom

### **Teoria do funcional da densidade aplicada a compostos do tipo 2tiopiridina com cisteíno-proteases (2012)**

Resumen

BONTURI, C., EL CHAMY MALUF, S., VEGA-TEIJIDO MA, SAMBRANO, J.R.

Evento: Internacional

Descripción: XXXVIII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina-Quitel

Ciudad: Natal, RN, Brasil.

Año del evento: 2012

Anales/Proceedings: XXXVIII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina-Quitel

Editorial: Organizadores del XXXVIII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina-Quitel

Palabras clave: Química Computacional

Áreas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: CD-Rom

### **Un abordaje teórico de la inhibición de la catepsina K por peróxido de hidrógeno (presentación oral) (2012)**

Resumen expandido

VEGA-TEIJIDO MA, VENTURA, O.N.

Evento: Internacional

Descripción: XXXVIII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina-Quitel

Ciudad: Natal, RN, Brasil.

Año del evento: 2012

Anales/Proceedings: XXXVIII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina-Quitel

Editorial: Organizadores del XXXVIII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina-Quitel

Palabras clave: Química Computacional

Áreas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Otros

La catepsina K (CatK) pertenece a una subfamilia de cisteína proteasas relacionadas con los procesos de digestión y renovación de las proteínas celulares humanas. La expresión de CatK es particularmente alta en osteoclastos y está asociada con la reabsorción ósea.[1] Su sobreactividad se ha asociado con enfermedades degenerativas como esclerosis ósea, osteoporosis y fragilidad ósea en general,[2] en fibroblastos, ha sido asociada con la erosión de cartílagos y artrosis.[3] El pasaje de los residuos de Cys de tiol a ácido sulfénico (sulfenilación) es actualmente considerado un paso importante en la formación de disulfuros proteicos, como mensajero en la señalización celular y regulador de actividad de algunas enzimas.[4] Recientemente Godat et al.(2008)[5] estudiaron la inactivación de CatK por peróxido de hidrógeno (H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>) y determinaron la formación reversible de ácido sulfénico en un tercio de los residuos Cys25. En este trabajo se presenta un abordaje teórico de la sulfenilación de este residuo modelado a tres niveles de aproximación: a) un sistema molecular, sI, formado por H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> y 5-metil-1,3-imidazolio (en representación de His162 protonada); b) un sistema molecular, sII, formado por H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>, 5-metil-1,3-imidazolio y metiltiolato (en representación de Cys25 aniónica); c) un sistema molecular, sIII, con H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> y la tríada catalítica de CatK (Cys25, His162 y Asn182) bajo la forma de par iónico; a los tres residuos se les preservó ambos enlaces peptídicos y la orientación cristalográfica de la cadena principal. El estudio fue realizado dentro de la Teoría del Funcional de la Densidad con el funcional híbrido B3LYP y funciones de base 6-311+G\* para sI y sII y 6-31+G\* para sIII, el solvente acuoso fue simulado por el método PCM; todos los cálculos fueron realizados con el programa Gaussian09. Los resultados con sI permiten observar que la protonación del peróxido de hidrógeno, H<sub>3</sub>O<sub>2</sub><sup>+</sup>, es estable en el estado triplete del sistema, mientras que el catión imidazolio lo es en el estado singulete. Similarmente, en sII el estado triplete es el que permite una energía más favorable para el complejo precursor del estado de transición, siendo a la vez, coherente con el avance de la sulfenilación. El estado singulete es aquel mayormente favorecido una vez que el grupo sulfénico es formado. Los cálculos con sIII confirman la orientación coherente de las especies formadas en los pasos de la reacción dentro del entorno enzimático representado por la tríada catalítica. [1] Tezuka, K.; Tezuka, Y.; Maejima, A.; Sato, T.; Nemoto, K.; Kamioka, H.; Hakeda, Y.; Kumegawa, M., J. Biol. Chem. 269, 1106 (1994). [2] Gelb, B. D.; Shi, G. P.; Chapman, H. A.; Desnick, R. J., Science 273, 1236 (1996). [3] Brömme, D.; Okamoto, K., Biol. Chem. Hoppe-Seyler 376, 379 (1995). [4] Roos, G.; Messens, J., Free Radic. Biol. Med. 51,314 (2011). [5] Godat, E.; Hervé-Grépinet, V.; Veillard, F.; Lecaille, F.; Belghazi, M.; Brömme, D.; Lalmanach, G., Biol. Chem. 389, 1123 (2008).

### **Docking aplicado à inibição de uma cisteino-protease por compostos do tipo 2-tiopiridina (2011)**

Resumen

BONTURI, C., EL CHAMY MALUF, S., SAMBRANO, J.R., VEGA-TEIJIDO MA

Evento: Regional

Descripción: Congresso Aberto aos Estudantes de Biologia (CAEB)

Ciudad: Campinas, SP, Brasil

Año del evento: 2011

Palabras clave: docking catepsina B

Áreas de conocimiento:

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

Electroquímica / Química Computacional  
Medio de divulgación: Papel

#### **Estudo Teórico do sítio ativo da Catepsina B (2011)**

Resumen

EL CHAMY MALUF, S., BONTURI, C., SAMBRANO, J.R., VEGA-TEIJIDO MA

Evento: Regional

Descripción: Congresso Aberto aos Estudantes de Biologia (CAEB)

Ciudad: Campinas, SP, Brasil

Año del evento: 2011

Palabras clave: catepsina B Química Cuántica

Areas de conocimiento:

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

#### **Modeling and docking studies of 1,2,4-thiadiazole and 2-thiopyridine derivatives in the active site of the cysteine protease cathepsin B (2011)**

Resumen

VEGA-TEIJIDO MA, EL CHAMY MALUF, S., BONTURI, C., VENTURA, O.N., SAMBRANO, J.R.

Evento: Internacional

Descripción: International Symposium: Thiol Metabolism and Redox Regulation of Cellular Functions.

Ciudad: Punta Ballena, Maldonado

Año del evento: 2011

Anales/Proceedings: Libro de Resúmenes

Publicación arbitrada

Palabras clave: docking cathepsin B thiadiazole 2-thiopyridine

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

Abstract: Several cellular disorders have been related to the overexpression of cysteine protease cathepsin B (CatB), for instance, rheumatic arthritis, muscular dystrophy, osteoporosis and tumor metastasis. Therefore, the inhibition of CatB is one of the ways to try control the unregulated cellular function and prevent tissue malformations. Inhibitory action of 1,2,4-thiadiazole and 2-thiopyridine derivatives has been associated in the literature with their capability to form disulfide bridges with the catalytic cysteine of CatB. The difference in inhibition mechanism of these two compound families is based on that it is the ring sulfur in 1,2,4-thiadiazole the one reacting with the catalytic Cys, while in 2-thiopyridine the reaction is centered on the disulfide group of the inhibitor. In this work we present molecular modeling and docking studies of the two types of inhibitors of CatB. Series of eight 1,2,4-thiadiazole and five 2-thiopyridine compounds were studied and compared in terms of docking scores. The substitutions in two positions (3 and 5) of the 1,2,4-thiadiazole ring were analyzed and the docking scores correlated to experimental data. A good fit was found for the binding energy of four related compounds (with different moieties in position 5). No correlation was observed for changes in position 3, and the differences in the reactivity for the ring opening are now being studied at the quantum chemistry level. The relationship between binding energy for the 2-thiopyridine series and the active site selectivity is analyzed and discussed.

#### **Modelagem computacional do mecanismo de inibição da Catepsina B por ligante derivado do 1,2,4-tiadiazol (2011)**

Completo

EL CHAMY MALUF, S., BONTURI, C., VEGA-TEIJIDO MA, SAMBRANO, J.R.

Evento: Regional

Descripción: XXIII Congresso de Iniciação Científica da UNESP (CIC)

Ciudad: Bauru, SP, Brasil

Año del evento: 2011

Anales/Proceedings: Livro de Resumos do XIII Congresso de Iniciação Científica UNESP

Publicación arbitrada

Palabras clave: catepsina B Química Cuántica

Areas de conocimiento:

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

Electroquímica / Química Computacional  
Medio de divulgación: CD-Rom  
Trabajo Seleccionado para la Etapa Estadual del congreso.

**Modelagem computacional do mecanismo de inibição da Catepsina B por ligante derivado do 1,2,4-tiadiazol (2011)**

Completo  
EL CHAMY MALUF, S., BONTURI, C., VEGA-TEIJIDO MA, SAMBRANO, J.R.

Evento: Nacional  
Descripción: XIII Congresso de Iniciação Científica UNESP (ETAPA ESTADUAL)  
Ciudad: São Pedro, SP, Brasil  
Año del evento: 2011  
Anales/Proceedings: Livro de Resumos do XIII Congresso de Iniciação Científica UNESP  
Publicación arbitrada  
Palabras clave: catepsina B Química Cuántica  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,  
Electroquímica / Química Computacional  
Medio de divulgación: CD-Rom  
Etapa Estadual del congreso.

**Simulação computacional da catepsina B: inibição por compostos do tipo 2-tiopiridina (2011)**

Completo  
BONTURI, C., EL CHAMY MALUF, S., VEGA-TEIJIDO MA, SAMBRANO, J.R.

Evento: Regional  
Descripción: XXIII Congresso de Iniciação Científica da UNESP (CIC)  
Ciudad: Bauru, SP, Brasil  
Año del evento: 2011  
Anales/Proceedings: Livro de Resumos do XIII Congresso de Iniciação Científica UNESP  
Publicación arbitrada  
Palabras clave: docking catepsina B  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,  
Electroquímica / Química Computacional  
Medio de divulgación: CD-Rom

**Estudio teórico del mecanismo de inhibición de cisteína proteasas por derivados de 1,2,4-tiadiazol (1,2,4-TDZ) (2011)**

Resumen  
VEGA-TEIJIDO MA, EL CHAMY MALUF, S., BONTURI, C., SAMBRANO, J.R., VENTURA, O.N.

Evento: Nacional  
Descripción: Segundo Encuentro Nacional de Ciencias Químicas (ENACUI 2011)  
Ciudad: Montevideo  
Año del evento: 2011  
Anales/Proceedings: Libro de Resúmenes  
Publicación arbitrada  
Palabras clave: docking catepsina B Química Cuántica tiadiazol  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,  
Electroquímica / Química Computacional  
Medio de divulgación: Papel  
Resumen: Algunas de las alteraciones celulares que han sido asociadas al aumento de actividad de la cisteína proteasa catepsina B (CatB) son la artritis reumática, la osteoporosis, la distrofia muscular y las metástasis tumorales. Recientemente, Leung-Toung et al. presentaron una serie de 8 compuestos derivados de 1,2,4-TDZ capaces de formar enlaces disulfuro con la Cys29 de la CatB, concomitantemente con la apertura del anillo tiadiazol. En este trabajo presentamos un estudio químico cuántico de los posibles pasos de la reacción de inhibición de las cisteína proteasas por derivados de 1,2,4-tiadiazol. El sistema molecular fue construido a partir de los estudios de docking del compuesto N-(metoxi-[1,2,4]tiadiazol-5-il)-L-leucil-L-prolina (1) en el sitio activo de la CatB, realizados previamente en nuestro grupo. Los cálculos fueron realizados usando la Teoría de Funcionales de la Densidad con el funcional híbrido B3LYP y las funciones de base 6-31++G\*\*.

Fueron evaluados todos los posibles estados de protonación del ligando y de los residuos del sitio activo, y se determinaron las condiciones estructurales que harían posible la apertura del anillo del 1,2,4-TDZ.

#### **Estudos de docking aplicados à inibição da Catepsina B por compostos do tipo TeCl<sub>2</sub>R<sub>2</sub> (2010)**

Resumen

BONTURI, C. , EL CHAMY MALUF, S. , PRESTES, A. , VEGA-TEIJIDO MA

Evento: Nacional

Descripción: 33a Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química

Ciudad: Aguas de Lindoia, SP, Brasil

Año del evento: 2010

Anales/Proceedings: Livro de Resumos da 33a Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química

Publicación arbitrada

Editorial: Comité Organizador da 33RASBQ

Palabras clave: docking Modelado Molecular telurio catepsina B

Areas de conocimiento:

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

Teóricos de Modelado Molecular

Medio de divulgación: CD-Rom

<http://www.s bq.org.br/33ra/>

#### **Modelagem Molecular e estudos de docking na catepsina B humana de ligantes derivados de 1,2,4-tiadiazol (2010)**

Resumen

EL CHAMY MALUF, S. , BONTURI, C. , PRESTES, A. , VEGA-TEIJIDO MA

Evento: Nacional

Descripción: 33a Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química

Ciudad: Aguas de Lindoia, SP, Brasil.

Año del evento: 2010

Anales/Proceedings: Livro de Resumos da 33RASBQ

Publicación arbitrada

Editorial: Comissão Organizadora da 33RASBQ

Palabras clave: docking Modelado Molecular catepsina B 1,2,4-tiadiazol

Areas de conocimiento:

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

Teóricos de Modelado Molecular

Medio de divulgación: CD-Rom

<http://www.s bq.org.br/33ra/>

#### **Simulação computacional da inibição da catepsina B por epoxisuccinilas (2010)**

Completo

BONTURI, C. , EL CHAMY MALUF, S. , VEGA-TEIJIDO MA , SAMBRANO, J.R.

Evento: Nacional

Descripción: XII Congresso de Iniciação Científica UNESP

Ciudad: Bauru, SP, Brasil

Año del evento: 2010

Anales/Proceedings: Livro de Resumos do XII Congresso de Iniciação Científica UNESP

Publicación arbitrada

Palabras clave: docking catepsina B

Areas de conocimiento:

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

Electroquímica / Química Computacional

Medio de divulgación: CD-Rom

Trabajo Seleccionado para la Etapa Estadual del congreso.

#### **Simulação computacional da inibição da catepsina B por epoxisuccinilas (2010)**

Completo

BONTURI, C. , EL CHAMY MALUF, S. , VEGA-TEIJIDO MA , SAMBRANO, J.R.

Evento: Nacional

Descripción: XII Congresso de Iniciação Científica UNESP (ETAPA ESTADUAL)

Ciudad: Marília, SP, Brasil  
Año del evento: 2010  
Anales/Proceedings: Livro de Resumos do XII Congresso de Iniciação Científica UNESP  
Publicación arbitrada  
Palabras clave: docking catepsina B  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,  
Electroquímica / Química Computacional  
Medio de divulgación: CD-Rom  
ETAPA ESTADUAL: el trabajo fue seleccionado en la Etapa de Bauru para participar de la instancia estadual.

**Modelagem molecular e estudos de docking na catepsina B humana de ligantes derivados de 1,2,4 tiadiazol (2010)**

Completo  
EL CHAMY MALUF, S., BONTURI, C., VEGA-TEIJIDO MA, SAMBRANO, J.R.

Evento: Regional  
Descripción: XII Congresso de Iniciação Científica UNESP  
Ciudad: Bauru, SP, Brasil  
Año del evento: 2010  
Anales/Proceedings: Livro de Resumos do XII Congresso de Iniciação Científica UNESP  
Publicación arbitrada  
Palabras clave: docking catepsina B  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,  
Electroquímica / Química Computacional  
Medio de divulgación: CD-Rom

**Estudos cristalográficos, de densidade eletrônica e de docking em catepsina B do composto [(E)-2-(4-metóxilfenil-1-dicloro-4-teluro)-3-cloro-propenil)-(terc-butil)-difenilsilano (RT101). (2009)**

Resumen  
VEGA-TEIJIDO MA, ZUKERMAN-SCHPECTOR, J., CARACELLI, I., CUNHA, R.L.O.R., COMASSETO, J.V.

Evento: Nacional  
Descripción: XV Simpósio Brasileiro de Química Teórica  
Ciudad: Poços de Caldas, MG, Brasil.  
Año del evento: 2009  
Anales/Proceedings: Livro de Resumos do XV Simpósio Brasileiro de Química Teórica  
Volumen: 1  
Página inicial: 167  
Publicación arbitrada  
Editorial: Comité Organizador do XV Simpósio Brasileiro de Química Teórica  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química /  
cristalografía, docking y Modelado Molecular  
Medio de divulgación: Papel  
<http://xv.sbqt.net/index.php>

**Sarcosina oxidase monomérica, um sistema biológico capaz de evidenciar as diferenças supramoleculares da família dos calcogênios. (2009)**

Resumen  
VEGA-TEIJIDO MA, VENTURA, O.N., ZUKERMAN-SCHPECTOR, J.

Evento: Nacional  
Descripción: XV Simpósio Brasileiro de Química Teórica  
Ciudad: Poços de Caldas, MG, Brasil.  
Año del evento: 2009  
Anales/Proceedings: Livro de Resumos do XV Simpósio Brasileiro de Química Teórica  
Volumen: 1  
Página inicial: 181  
Editorial: Comité Organizador do XV Simpósio Brasileiro de Química Teórica  
Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

<http://xv.sbqt.net/index.php>

#### **Mecanismo de inibição da catepsina B por epoxisuccinilas (2009)**

Resumen

BONTURI, C. , EL CHAMY MALUF, S. , VEGA-TEIJIDO MA

Evento: Local

Descripción: XII Semana da Física, FC, UNESP/Bauru

Ciudad: Bauru, SP, Brasil.

Año del evento: 2009

Anales/Proceedings: Resumos XII da Semana da Física, FC, UNESP/Bauru

Editorial: Comité Organizador da XII Semana da Física, FC, UNESP/Bauru

Areas de conocimiento:

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

Modelado Molecular

Medio de divulgación: CD-Rom

#### **Modelagem molecular do complexo da catepsina B com um derivado de 1,2,4-tiadiazol. (2009)**

Resumen

EL CHAMY MALUF, S. , BONTURI, C. , VEGA-TEIJIDO MA

Evento: Local

Descripción: XII Semana da Física, FC, UNESP/Bauru

Ciudad: Bauru, SP, Brasil.

Año del evento: 2009

Anales/Proceedings: Resumos da XII Semana da Física, FC, UNESP/Bauru

Editorial: Comité Organizador da XII Semana da Física, FC, UNESP/Bauru

Areas de conocimiento:

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

Modelado Molecular

Medio de divulgación: CD-Rom

#### **BELCalc um banco de estruturas de ligantes calcogênicos para Virtual Screening como inibidores enzimáticos. (2008)**

Resumen

VEGA-TEIJIDO MA , CARACELLI, I. , ZUKERMAN-SCHPECTOR, J.

Evento: Nacional

Descripción: II Encontro sobre Selênio e Telúrio-Brasil.

Ciudad: Campos do Jordão, SP, Brasil

Año del evento: 2008

Anales/Proceedings: Livro de Resumos do II Encontro sobre Selênio e Telúrio-Brasil.

Volumen: 1

Publicación arbitrada

Editorial: Comité Organizador do II Encontro sobre Selênio e Telúrio-Brasil.

Areas de conocimiento:

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

Química Cuántica

Medio de divulgación: Papel

<http://www.fcf.usp.br/extensao/eventos/fbf/Congresso/index.php>

#### **Estudos cristalográficos, de densidade eletrônica e de docking na catepsina B do composto 4,4-dicloro-1,3,4-telluraoct-2-en-1-ona. (2008)**

Resumen

VEGA-TEIJIDO MA , ZUKERMAN-SCHPECTOR, J. , CARACELLI, I. , CUNHA, R.L.O.R. , COMASSETO, J.V.

Evento: Nacional

Descripción: II Encontro sobre Selênio e Telúrio-Brasil.

Ciudad: Campos do Jordão, SP, Brasil.

Año del evento: 2008

Anales/Proceedings: Livro de Resumos do II Encontro sobre Selênio e Telúrio-Brasil.  
Publicación arbitrada  
Editorial: II Encontro sobre Selênio e Telúrio-Brasil  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química /  
cristalografía, docking y Química Cuántica  
Medio de divulgación: Papel  
<http://www.fcf.usp.br/extensao/eventos/fbf/Congresso/index.php>

#### **Estudos de docking de um composto de Te(IV). (2008)**

Resumen  
MAGANHI, S.H. , ZUKERMAN-SCHPECTOR, J. , CUNHA, R.L.O.R. , VEGA-TEIJIDO MA,  
COMASSETO, J.V. , CARACELLI, I.

Evento: Nacional  
Descripción: II Encontro sobre Selênio e Telúrio-Brasil.  
Ciudad: Campos do Jordão, SP, Brasil.  
Año del evento: 2008  
Anales/Proceedings: Livro de Resumos do II Encontro sobre Selênio e Telúrio-Brasil.  
Editorial: Comité Organizador do II Encontro sobre Selênio e Telúrio-Brasil.  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química / cristalografía  
y docking  
Medio de divulgación: Papel  
<http://www.fcf.usp.br/extensao/eventos/fbf/Congresso/index.php>

#### **Estudos do mecanismo de reação do triclorometil Te(IV) com o sistema Cisteína-Histidina representando os sítio ativo das cisteíno proteases. (2008)**

Resumen  
VEGA-TEIJIDO MA , SAMBRANO, J.R. , ZUKERMAN-SCHPECTOR, J.

Evento: Nacional  
Descripción: II Encontro sobre Selênio e Telúrio-Brasil.  
Ciudad: Campos do Jordão, SP, Brasil.  
Año del evento: 2008  
Anales/Proceedings: II Encontro sobre Selênio e Telúrio-Brasil  
Publicación arbitrada  
Editorial: II Encontro sobre Selênio e Telúrio-Brasil  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química / Química  
Cuántica  
Medio de divulgación: Papel  
<http://www.fcf.usp.br/extensao/eventos/fbf/Congresso/index.php>

#### **Simulação Computacional de Docking Molecular no Estudo da Formação de Complexos DNA-Ligantes (2008)**

Resumen  
RODRIGUES, S.R.P. , CARACELLI, I. , VEGA-TEIJIDO MA

Evento: Local  
Descripción: XV Semana da Biologia, FC, UNESP/Bauru.  
Ciudad: Bauru, SP, Brasil.  
Año del evento: 2008  
Anales/Proceedings: Resumos da XV Semana da Biologia  
Editorial: Comité Organizador da XV Semana da Biologia  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química / docking y  
Modelado Molecular  
Medio de divulgación: CD-Rom  
[http://www2.fc.unesp.br/semana\\_biologia/a\\_semana.html](http://www2.fc.unesp.br/semana_biologia/a_semana.html)

#### **Crystallographic and theoretical studies of the supramolecular arrangement of 4,4-dichloro-1,3-diphenyl-4(##)-tellurooct-2-en-1-one (2007)**

Resumen



CARACELLI, I. , ZUKERMAN-SCHPECTOR, J. , VEGA-TEIJIDO MA , CUNHA, R.L.O.R. ,  
COMASSETO, J.V.

Evento: Internacional

Descripción: Supramolecular Chemistry from design to applications - SUPCHEM, 2007.

Ciudad: Cluj-Napoca, Rumania.

Año del evento: 2007

Anales/Proceedings: SUPCHEM - Book of abstracts

Página inicial: 30

Publicación arbitrada

Áreas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

<http://www.chem.ubbcluj.ro/romana/conferinte/supchem/index.html>

#### **Docking de fenilpirazóis nas flavoenzimas tripanotona e glutatona redutase (2007)**

Resumen

CABRAL DE MELO, C. , VEGA-TEIJIDO MA , CARACELLI, I. , FREITAS, A.C.C. , ZUKERMAN-SCHPECTOR, J.

Evento: Internacional

Descripción: XIV Simpósio Brasileiro de Química Teórica SBQT

Ciudad: Poços de Caldas, MG, Brasil.

Año del evento: 2007

Anales/Proceedings: Livro de Resumos do XIV Simpósio Brasileiro de Química Teórica SBQT

Página inicial: 249

Publicación arbitrada

Editorial: Comité Organizador do XIV Simpósio Brasileiro de Química Teórica SBQT

Áreas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

<http://xv.sbqt.net/apresentacao.php>

#### **Docking de uma telurooxetana em catepsina B (2007)**

Resumen

MAGANHI, S.H. , VEGA-TEIJIDO MA , ZUKERMAN-SCHPECTOR, J. , CUNHA, R.L.O.R. ,  
COMASSETO, J.V. , CARACELLI, I.

Evento: Nacional

Descripción: XIV Simpósio Brasileiro de Química Teórica SBQT

Ciudad: Poços de Caldas, MG, Brasil.

Año del evento: 2007

Anales/Proceedings: Livro de Resumos do XIV Simpósio Brasileiro de Química Teórica SBQT

Página inicial: 240

Publicación arbitrada

Editorial: Comité Organizador do XIV Simpósio Brasileiro de Química Teórica SBQT

Áreas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

#### **Estudos de docking e cálculos quânticos aplicados á inibição de cisteíno-proteases por Te(IV)-dipnonas (2007)**

Resumen

VEGA-TEIJIDO MA , ZUKERMAN-SCHPECTOR, J. , CARACELLI, I. , CUNHA, R.L.O.R. ,  
COMASSETO, J.V.

Evento: Nacional

Descripción: XIV Simpósio Brasileiro de Química Teórica SBQT

Ciudad: Poços de Caldas, MG, Brasil.

Año del evento: 2007

Anales/Proceedings: Livro de Resumos do XIV Simpósio Brasileiro de Química Teórica SBQT

Página inicial: 48  
Publicación arbitrada  
Editorial: XIV Simpósio Brasileiro de Química Teórica SBQT  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química / cristalografía, docking y Química Cuántica  
Medio de divulgación: Papel

#### **Facts and artifacts in the Te...δ-aryl interactions (2007)**

Resumen  
ZUKERMAN-SCHPECTOR, J. , VEGA-TEIJIDO MA , CARACELLI, I. , HAIDUC, I.

Evento: Nacional  
Descripción: XIV Simpósio Brasileiro de Química Teórica SBQT  
Ciudad: Poços de Caldas, MG, Brasil.  
Año del evento: 2007  
Anales/Proceedings: Livro de Resumos do XIV Simpósio Brasileiro de Química Teórica SBQT  
Página inicial: 53  
Publicación arbitrada  
Editorial: Comité Organizador do XIV Simpósio Brasileiro de Química Teórica SBQT  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química / cristalografía y Química Cuántica  
Medio de divulgación: Papel

#### **Simulação computacional para estudo da formação de complexos entre DNA e compostos de cromo. (2007)**

Resumen  
CAMILO DOS REIS, E. , CABRAL DE MELO, C. , VEGA-TEIJIDO MA , CARACELLI, I.

Evento: Nacional  
Descripción: XIV Simpósio Brasileiro de Química Teórica SBQT  
Ciudad: Poços de Caldas, MG, Brasil.  
Año del evento: 2007  
Anales/Proceedings: Livro de Resumos do XIV Simpósio Brasileiro de Química Teórica SBQT  
Página inicial: 258  
Publicación arbitrada  
Editorial: Comité Organizador do XIV Simpósio Brasileiro de Química Teórica SBQT  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química / docking y Modelado Molecular  
Medio de divulgación: Papel

#### **Supramolecular arrangements in (organo) tellurium compounds: crystallographic and theoretical studies. (2007)**

Resumen  
ZUKERMAN-SCHPECTOR, J. , VEGA-TEIJIDO MA , CARACELLI, I. , HAIDUC, I.

Evento: Internacional  
Descripción: Supramolecular Chemistry from design to applications - SUPCHEM, 2007  
Año del evento: 2007  
Anales/Proceedings: SUPCHEM - Book of abstracts  
Página inicial: 21  
Publicación arbitrada  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química / cristalografía y Química Cuántica  
Medio de divulgación: Papel  
<http://www.chem.ubbcluj.ro/romana/conferinte/supchem/index.html>

#### **Estruturas cristalinas e moleculares de algumas Teluro dipnonas (2006)**

Resumen  
VEGA-TEIJIDO MA , ZUKERMAN-SCHPECTOR, J. , CARACELLI, I. , CUNHA, R.L.O.R. , COMASSETO, J.V.

Evento: Nacional  
Descripción: I Encontro sobre Selênio e Telúrio-Brasil  
Ciudad: Bento Gonçalves, RS, Brasil.  
Año del evento: 2006  
Anales/Proceedings: Livro de Resumos do I Encontro sobre Selênio e Telúrio-Brasil  
Publicación arbitrada  
Editorial: Comitê Organizador do I Encontro sobre Selênio e Telúrio-Brasil  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química / cristalografía, docking y Química Cuántica  
Medio de divulgación: Papel  
<http://w3.ufsm.br/esete/Resumos%20I%20ESeTe.pdf>

#### **Telurooxetanas: um estudo molecular e supramolecular (2006)**

Resumen  
ZUKERMAN-SCHPECTOR, J. , CARACELLI, I. , VEGA-TEIJIDO MA , CUNHA, R.L.O.R. ,  
COMASSETO, J.V.

Evento: Nacional  
Descripción: I Encontro sobre Selênio e Telúrio-Brasil  
Ciudad: Bento Gonçalves, RS, Brasil.  
Año del evento: 2006  
Anales/Proceedings: Livro de Resumos do I Encontro sobre Selênio e Telúrio-Brasil  
Publicación arbitrada  
Editorial: Comitê Organizador do I Encontro sobre Selênio e Telúrio-Brasil  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química / cristalografía  
Medio de divulgación: Papel  
<http://w3.ufsm.br/esete/Resumos%20I%20ESeTe.pdf>

#### **Estudos de docking de Te(IV)-dipnonas numa cisteíno protease. (2006)**

Resumen  
VEGA-TEIJIDO MA , ZUKERMAN-SCHPECTOR, J. , CARACELLI, I. , CUNHA, R.L.O.R. ,  
COMASSETO, J.V.

Evento: Nacional  
Descripción: I Encontro sobre Selênio e Telúrio-Brasil  
Ciudad: Bento Gonçalves, RS, Brasil.  
Año del evento: 2006  
Anales/Proceedings: Livro de Resumos do I Encontro sobre Selênio e Telúrio-Brasil  
Publicación arbitrada  
Editorial: Comitê Organizador do I Encontro sobre Selênio e Telúrio-Brasil  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química / docking y Modelado Molecular  
Medio de divulgación: Papel  
<http://w3.ufsm.br/esete/Resumos%20I%20ESeTe.pdf>

#### **Crystal structure and docking studies of a human cathepsin B inhibitor: (Z)-1,3-bis(2-methoxyphenyl)-4-(trichlorotelluro)-but-2-en-1-one. (2006)**

Resumen  
ZUKERMAN-SCHPECTOR, J. , VEGA-TEIJIDO MA , CARACELLI, I. , CUNHA, R.L.O.R. ,  
COMASSETO, J.V. , URANO, M.E. , TERSARIOL, I.L.S.

Evento: Internacional  
Descripción: 1st European Chemistry Congress  
Ciudad: Budapest, Hungría.  
Año del evento: 2006  
Anales/Proceedings: 1st European Chemistry Congress - Book of Abstracts  
Publicación arbitrada  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química / cristalografía, docking y Química Cuántica

Medio de divulgación: Papel  
<http://www.euchems-budapest2006.hu/>

**Crystal structure and theoretical studies of two arylTe(L) iodine complexes. (2005)**

Resumen

VEGA-TEIJIDO MA , CARACELLI, I. , LEDESMA, G. , SHULZ LANG, E. , ZUKERMAN-SCHPECTOR, J.

Evento: Nacional

Descripción: XIII Simpósio Brasileiro de Química Teórica

Ciudad: São Pedro, SP, Brasil.

Año del evento: 2005

Anales/Proceedings: Livro de Resumos do XIII Simpósio Brasileiro de Química Teórica

Publicación arbitrada

Editorial: XIII Simpósio Brasileiro de Química Teórica

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

**Crystallographic and theoretical studies of the supramolecular packing of 4,4-dichloro-1,3-diphenyl-4-telluroct-2-en-1-one. (2005)**

Resumen

VEGA-TEIJIDO MA , ZUKERMAN-SCHPECTOR, J. , CARACELLI, I. , CUNHA, R.L.O.R. , COMASSETO, J.V.

Evento: Nacional

Descripción: XIII Simpósio Brasileiro de Química Teórica

Ciudad: São Pedro, SP, Brasil.

Año del evento: 2005

Anales/Proceedings: Livro de Resumos do XIII Simpósio Brasileiro de Química Teórica

Editorial: Comité Organizador do XIII Simpósio Brasileiro de Química Teórica

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

**Diorganotellurium (IV) Dihalides: looking for the best theoretical treatment. (2003)**

Resumen

VEGA-TEIJIDO MA , VENTURA, O.N. , ZUKERMAN-SCHPECTOR, J.

Evento: Regional

Descripción: XIV Encontro Regional da SBQ (Araraquara-Ribeirão Preto-São Carlos)

Ciudad: São Carlos, SP, Brasil.

Año del evento: 2003

Anales/Proceedings: Livro de Resumos do XIV Encontro Regional da SBQ (Araraquara-Ribeirão Preto-São Carlos)

Editorial: Comité Organizador do XIV Encontro Regional da SBQ (Araraquara-Ribeirão Preto-São Carlos)

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

**Estudo teórico do polimorfismo conformacional de dicloro[(E)-2-cloro-1-vinilcicloexanol][(4-metoxifenil) Te(IV) (2002)**

Resumen

VEGA-TEIJIDO MA , CAMILLO, R. L. , CARACELLI, I. , ZUKERMAN-SCHPECTOR, J.

Evento: Internacional

Descripción: XXVIII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina - QUITEL2002

Ciudad: Montevideo, Uruguay.

Año del evento: 2002

Anales/Proceedings: XXVIII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina - QUITEL2002

Publicación arbitrada  
Editorial: XXVIII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina - QUITEL2002  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química / cristalografía y Química Cuántica  
Medio de divulgación: Papel

**Docking studies of a series of heterocyclic- and 2-hydroxy-naphtoquinones in the three putative binding sites of GR and TR (2001)**

Resumen  
VEGA-TEIJIDO MA , CARACELLI, I. , ZUKERMAN-SCHPECTOR, J.

Evento: Internacional  
Descripción: 3rd. Workshop on Chemical Structure and Biological Activity: Perspectives in QSAR  
Ciudad: São Paulo, SP, Brasil.  
Año del evento: 2001  
Anales/Proceedings: Livro de Resumos do 3rd. Workshop on Chemical Structure and Biological Activity: Perspectives in QSAR  
Publicación arbitrada  
Editorial: 3rd. Workshop on Chemical Structure and Biological Activity: Perspectives in QSAR  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química / docking y Modelado Molecular  
Medio de divulgación: Papel

**Molecular Modelling and AM1 conformational analyses of calcium entry blockers and activators. (2001)**

Resumen  
VEGA-TEIJIDO MA , NUNES, F. M. , CAMILLO, R. L. , PLUT, F. , STEFANI, H. A. , GATTI, P. M. , ZUKERMAN-SCHPECTOR, J.

Evento: Nacional  
Descripción: 24a Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química (24RASBQ)  
Ciudad: Poços de Caldas, MG, Brasil.  
Año del evento: 2001  
Anales/Proceedings: Livro de Resumos do 24a Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química (24RASBQ)  
Publicación arbitrada  
Editorial: 24a Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química (24RASBQ)  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química / cristalografía y Química Cuántica  
Medio de divulgación: Papel

**Crystal and Molecular Structure of a Diorganotellurium Dichloride Compound. (2000)**

Resumen  
VEGA-TEIJIDO MA , CAMILLO, R. L. , CARACELLI, I. , LEMOS, F.C.D. , CUNHA, R.L.O.R. , COMASSETO, J.V. , ZUKERMAN-SCHPECTOR, J.

Evento: Internacional  
Descripción: 8th International Conference on the Chemistry of Selenium and Tellurium (8thICCST)  
Ciudad: Aguas de São Pedro, SP, Brasil  
Año del evento: 2000  
Anales/Proceedings: 8th International Conference on the Chemistry of Selenium and Tellurium (8thICCST)  
Publicación arbitrada  
Editorial: 8th International Conference on the Chemistry of Selenium and Tellurium (8thICCST)  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química / cristalografía y Química Cuántica  
Medio de divulgación: Papel

**Dichloro [(E)-2-Chloro-1-Vinilcyclohexanol](4-Methoxyphenyl) Te(IV). A Case of Conformational Polymorphism. (2000)**

Resumen

VEGA-TEIJIDO MA, CAMILLO, R. L., CARACELLI, I., COMASSETO, J.V., STEFANI, H. A., CHIEFFI, A.E., ZUKERMAN-SCHPECTOR, J.

Evento: Internacional

Descripción: 8th International Conference on the Chemistry of Selenium and Tellurium (8thICCST)

Ciudad: Aguas de São Pedro, SP, Brasil

Año del evento: 2000

Anales/Proceedings: 8th International Conference on the Chemistry of Selenium and Tellurium (8thICCST)

Publicación arbitrada

Editorial: 8th International Conference on the Chemistry of Selenium and Tellurium (8thICCST)

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

**X-ray Crystallographic, Molecular Modelling and Docking Studies of Two Analogues of Nifurtimox. (2000)**

Resumen

VEGA-TEIJIDO MA, CARACELLI, I., PAULINO, M., CERECETTO, H., ZUKERMAN-SCHPECTOR, J.

Evento: Nacional

Descripción: 23a Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química (23RASBQ)

Ciudad: Poços de Caldas, MG, Brasil.

Año del evento: 2000

Anales/Proceedings: 23a Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química (23RASBQ)

Publicación arbitrada

Editorial: 23a Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química (23RASBQ)

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química / cristalografía, docking y Química Cuántica

Medio de divulgación: Papel

**Estudio teorico-experimental de las interacciones entre el ADN y la proteina CreA en Aspergillus nidulans (1998)**

Resumen

ESPERON, P., VEGA-TEIJIDO MA, PAULINO, M., VITAL, M., SCAZZOCCHIO, C.

Evento: Internacional

Descripción: VII Congreso Ibero-Americano de Biología Celular

Ciudad: Montevideo, Uruguay.

Año del evento: 1998

Anales/Proceedings: VII Congreso Ibero-Americano de Biología Celular

Publicación arbitrada

Editorial: VII Congreso Ibero-Americano de Biología Celular

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

**Structural aspects of specificity in Trypanothione and Glutathione Reductases binding sites and the design of new compounds with potential anti-trypanosomal activity (1997)**

Completo

PAULINO, M., IRIBARNE, F., HIKICHI, N., HANSZ, M., VEGA-TEIJIDO MA, TAPIA, O.

Evento: Internacional

Descripción: Technical Report Uppsala University

Ciudad: Uppsala, Suecia.

Año del evento: 1997

Anales/Proceedings: Technical Report Uppsala University

Volumen: 97

Publicación arbitrada

Editorial: Uppsala University  
Ciudad: Uppsala, Suecia.  
Palabras clave: Modelado Molecular  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,  
Electroquímica / modelado molecular  
Medio de divulgación: Papel

**Structural aspects of specificity in trypanothione and glutathione reductases binding sites and design of new compounds with potential anti-trypanosomal activity. (1997)**

Resumen  
PAULINO, M. , IRIBARNE, F. , HIKICHI, N. , HANSZ, M. , VEGA-TEIJIDO MA , TAPIA, O.

Evento: Internacional  
Descripción: 6o COST/ACRIVAL/IOCD, Congress on Antiparasitic Chemoterapy  
Ciudad: Leuven, Bélgica.  
Año del evento: 1997  
Anales/Proceedings:6o COST/ACRIVAL/IOCD, Congress on Antiparasitic Chemoterapy  
Editorial: 6o COST/ACRIVAL/IOCD, Congress on Antiparasitic Chemoterapy  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química / Dinámica Molecular  
Medio de divulgación: Papel

**Comparison of glutathione reductase and trypanothione reductase binding sites. (1995)**

Resumen  
PAULINO, M. , IRIBARNE, F. , HIKICHI, N. , HANSZ, M. , VEGA-TEIJIDO MA , TAPIA, O.

Evento: Internacional  
Descripción: XXII Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina (QUITEL)  
Ciudad: Pucón, Chile.  
Año del evento: 1995  
Anales/Proceedings:XXII Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina (QUITEL)  
Editorial: XXII Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina (QUITEL)  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química / Dinámica Molecular  
Medio de divulgación: Papel

**XXII Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina (QUITEL) (1993)**

Resumen  
PAULINO, M. , IRIBARNE, F. , VEGA-TEIJIDO MA , BUGARIN, G. , TAPIA, O.

Evento: Internacional  
Descripción: 2do. Congreso de Ciencias Farmacéuticas del Cono Sur  
Ciudad: Montevideo, Uruguay.  
Año del evento: 1993  
Anales/Proceedings:2do. Congreso de Ciencias Farmacéuticas del Cono Sur  
Publicación arbitrada  
Editorial: 2do. Congreso de Ciencias Farmacéuticas del Cono Sur  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química / Dinámica Molecular  
Medio de divulgación: Papel

## Formación de RRHH

### TUTORÍAS CONCLUIDAS

### OTRAS

### TEORIA DO FUNCIONAL DA DENSIDADE APLICADA AO ESTUDO DO MECANISMO DE INIBICAO

## **DE CISTEINO-PROTEASES POR LIGANTES DERIVADOS DO 1,2,4-TIDIAZOL (FAPESP 2009-2012) (2012)**

Iniciación a la investigación

Sector Extranjero/Internacional/Otros / Universidad Estadual Paulista , Brasil

Tipo de orientación: Tutor único o principal

Nombre del orientado: Sarah El Chamy Maluf

Medio de divulgación: Internet

País/Idioma: Brasil, Portugués

Palabras Clave: docking catepsina B 1,2,4-tiadiazoles

Areas de conocimiento:

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

La alumna Sarah El Chamy Maluf tuvo una Beca FAPESP de Iniciação Científica (Proceso 2009/52188-8), Tutorres: Mauricio A. Vega-Tejjido y Júlio R. Sambrano (2009-2012)

## **TEORIA DO FUNCIONAL DA DENSIDADE APLICADA A COMPOSTOS DO TIPO 2-TIOPIRIDINA COM CISTEINO-PROTEASES. (FAPESP 2009-2012) (2009)**

Iniciación a la investigación

Sector Extranjero/Internacional/Otros / Universidad Estadual Paulista , Brasil

Tipo de orientación: Tutor único o principal

Nombre del orientado: Camila Ramalho Bonturi

Medio de divulgación: Internet

País/Idioma: Brasil, Portugués

Palabras Clave: docking catepsina B 2-tiopiridinas

Areas de conocimiento:

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

La alumna Camila Ramalho Bonturi obtuvo una Beca FAPESP de Iniciação Científica (Proceso 2009/52189-4), Tutores Mauricio A. Vega-Tejjido y Júlio R. Sambrano. (2009-2012)

## **TUTORÍAS EN MARCHA**

### **POSGRADO**

#### **Estudio computacional, comparación experimental y prospectiva de colorantes tipo BODIPY conteniendo calcógenos (S, Se, Te). (2017)**

Tesis de doctorado

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

Programa: Doctorado en Química (UDELAR-PEDECIBA)

Tipo de orientación: Tutor único o principal

Nombre del orientado: Gabriel Esteves

Medio de divulgación: Internet

País/Idioma: Uruguay, Español

Palabras Clave: telurio selenio calcógenos DFT

Areas de conocimiento:

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

El Ing.Quím Gabriel Esteves colabora desde 2016 en estudios de química cuántica realizados por el Dr, Mauricio Vega Teiido. En este semestre se encuentra formalizando su inscripción a la Postgraduación de Facultad de Química y al programa PEDECIBA, sus trabajos de Tesis de Doctorado comenzarán en junio de 2017.

#### **Caracterización genómica y proteómica de dioxigenasas responsables del clivaje de carotenoides de especies de citrus (2016)**

Tesis de maestria

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

Tipo de orientación: Asesor/Orientador

Nombre del orientado: Jorge Cantero Piñanez

Medio de divulgación: Internet

País/Idioma: Uruguay, Español

Palabras Clave: Modelado Molecular Dinámica Molecular carotenoides CCD4 dioxigenasas

Areas de conocimiento:



Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Ciencias de las Plantas, Botánica  
El alumno Jorge Cantero está realizando desde 2016 su Tesis de Maestría en Bioinformática (PEDECIBA) bajo la tutoría de la Dra. Margot Paulino y con la colaboración del Dr. Mauricio Vega Teijido.

## OTRAS

### **Pasantía en Introducción al Modelado Molecular (2019)**

Iniciación a la investigación  
Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química - UDeLaR / CCBG/DETEMA , Uruguay  
Tipo de orientación: Asesor/Orientador  
Nombre del orientado: Ana Lima  
Medio de divulgación: Otros  
País/Idioma: Uruguay, Español  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Cuántica y Mecánica Molecular  
Orientador en los trabajos de Pasantía en Investigación de la estudiante de la Licenciatura en Bioquímica Ana Lima

### **Estudios teóricos de colorantes fluorescentes tipo BODIPY (2018)**

Iniciación a la investigación  
Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química - UDeLaR / Computational Chemistry and Biology Group - CCBG , Uruguay  
Tipo de orientación: Tutor único o principal  
Nombre del orientado: Lucía Suárez  
País/Idioma: Uruguay, Español  
Palabras Clave: TD-DFT BODIPY Fluorescence  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas

### **Bioinformática II, Maestría en Bioinformática/PEDECIBA (2013)**

Otras tutorías/orientaciones  
Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química - UDeLaR , Uruguay  
Nombre del orientado: Estudiantes del Curso BioInfoII  
Medio de divulgación: Otros  
País/Idioma: Uruguay, Español  
Palabras Clave: docking Modelado Molecular Bioinformática estructural  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Bioinformática Estructural  
El curso de Bioinformática II (2013) de la Maestría en Bioinformática/PEDECIBA cuenta con 13 inscriptos. El curso involucra el desarrollo de un miniproyecto de setiembre a diciembre donde los estudiantes son orientados en las herramientas computacionales y los fundamentos teóricos y prácticos para la realización de un trabajo de investigación en bioinformática. Algunos de los alumnos reciben el tema de su miniproyecto dentro de las líneas de investigación del CenBioInfo/DETEMA/Fac. de Química y otros alumnos inician y/o desarrollan los trabajos de bioinformática estructural que forman parte de sus tesis. Nuestra labor docente en este curso tiene un perfil de formación y orientación en investigación.

## Indicadores de producción

<b>PRODUCCIÓN BIBLIOGRÁFICA</b>	<b>92</b>
<b>Artículos publicados en revistas científicas</b>	22
Completo	20
Resumen	2
<b>Trabajos en eventos</b>	68
<b>Libros y Capítulos</b>	2

Libro publicado	1
Capítulos de libro publicado	1
<b>EVALUACIONES</b>	<b>8</b>
<b>Evaluación de eventos</b>	6
<b>Evaluación de publicaciones</b>	2
<b>FORMACIÓN RRHH</b>	<b>7</b>
<b>Tutorías/Orientaciones/Supervisiones concluidas</b>	2
Iniciación a la investigación	2
<b>Tutorías/Orientaciones/Supervisiones en marcha</b>	5
Tesis de maestría	1
Tesis de doctorado	1
Otras tutorías/orientaciones	1
Iniciación a la investigación	2