

Santiago Di Lella

INFORMACIÓN PERSONAL	DNI 28.681.673 13 de abril de 1981, San Miguel de Tucumán Nacionalidad argentina Soltero	Domicilio: Venezuela 452 - Dpto. 10 C1095AAJ Ciudad de Buenos Aires <i>Celular:</i> (+54911) 53780088 <i>E-mail:</i> santi@qi.fcen.uba.ar
POSICIÓN ACTUAL	Becrio Interno Postdoctoral Instituto de Química-Física de los Materiales, Medio Ambiente y Energía (Conicet-UBA) Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas	Abril de 2009 a la fecha <ul style="list-style-type: none">• Tema: Estudios de posibles mecanismos de inhibición de la interacción entre galectina-1 y sus glicanos específicos• Director: Dr. Darío A. Estrin• Co-director: Dr. Gabriel A. Rabinovich
INTERESES	Biofísica, bioinformática, simulación computacional, bioquímica, química teórica, glicobiología, termodinámica	
EDUCACIÓN	Universidad Nacional de Tucumán, Argentina <i>Facultad de Bioquímica, Química y Farmacia</i> Doctor en Ciencias Químicas , abril de 2009. <ul style="list-style-type: none">• Tema de tesis: "Participación de las moléculas de agua en la estructura y función de proteínas"• Calificación: 10 (diez) Sobresaliente.• Director: Dr. Juan Carlos Díaz Ricci• Directora Asociada: Dra. Rosa María Susana Álvarez Licenciado en Química , abril de 2005. <ul style="list-style-type: none">• Promedio general de la carrera: 9,65 sobre 10. Colegio Nueva Concepción, San Miguel de Tucumán, Argentina Bachiller Nacional Bilingüe Modalizado en Ciencias y Letras , diciembre de 1998.	
PREMIOS Y DISTINCIONES	IBM-Zerner Fellowship, 49 th Sanibel Symposium, University of Florida, Estados Unidos, 2009. Mejor promedio de la carrera de Licenciatura en Química, Facultad de Bioquímica, Química y Farmacia, Universidad Nacional de Tucumán, 2004. 1 ^a Escolta de la Bandera de Ceremonias, Facultad de Bioquímica, Química y Farmacia, Universidad Nacional de Tucumán, 2004.	
BECAS GANADAS	Beca Interna Postdoctoral, Conicet, abril de 2009 a abril de 2011. Dirección: Dr. Darío A. Estrin. Co-dirección: Dr. Gabriel Rabinovich. <i>Fulbright</i> - Fundación Bunge y Born, <i>Junior Researcher</i> 2007. Beca Interna de Posgrado Tipo I, Conicet, abril de 2005 a abril de 2009. Dirección: Dr. Juan Carlos Díaz Ricci. Co-dirección: Dra. Rosa M. Álvarez. Beca de la Asociación de Universidades "Grupo Montevideo", para participar en el programa de movilidad Escala Estudiantil 2004, en la Universidade Federal de Minas Gerais, Belo Horizonte,	

Minas Gerais, Brasil.

- PUBLICACIONES Di Lella, S., Petruk, A. A., Armiño, D. A. d., Álvarez, R. M. S. Specific intermolecular interactions of conserved water molecules with amino acids in the galectin-1 carbohydrate recognition domain. **2010** *Journal of Molecular Structure*, en prensa.
- Gauto, D. F., Di Lella, S., Guardia, C. M., Estrin, D. A., Martí, M. A. Carbohydrate binding proteins: Dissecting ligand structures through solvent environment occupancy. **2009** *Journal of Physical Chemistry B* 113:8717-8724.
- Di Lella, S., Ma, L., Díaz Ricci, J. C., Rabinovich, G. A., Asher, S. A., Álvarez, R. M. Critical role of water molecules in galectin-1 binding to the disaccharide lactose. **2009** *Biochemistry* 48:786-791.
- Di Lella, S., Martí, M. A., Álvarez, R. M., Estrin, D. A., Díaz Ricci, J. C. Characterization of galectin-1 carbohydrate recognition domain in terms of solvent occupancy. **2007** *Journal of Physical Chemistry B* 111:7360-7366.
- Bikiel, D. E., Boechi, L., Capece, A., Crespo, A., De Biase, P. M., Di Lella, S., González Lebrero, M. C., Martí, M. A., Nadra, A. D., Perissinotti, L. L., Shcerlis, D. A., Estrin, D. A. Modeling heme proteins using atomistic simulation. Review article. **2006** *Physical Chemistry Chemical Physics* 48:5611-5628.
- PUBLICACIONES EN PREPARACIÓN Di Lella, S., Martí, M. A., Croci, D., Guardia, C., Díaz Ricci, J. C., Caramelo, J., Rabinovich, G.A., Estrin, D. A. Linking structure and thermal stability of the β -galactoside-binding protein galectin-1 to ligand binding and dimerization equilibria. *Biochemistry*, en revisión, mayo de 2010.
- Gauto, D. F., Di Lella, S., Estrin, D. A., Structural basis for ligand recognition in a mushroom lectin: Solvent structure as specificity predictor. Enviado a *Proteins*, 2010.
- Di Lella, S., Rabinovich, G. A., Galectin-1: from biophysics to immunoregulation. Artículo invitado. *Biofactors*
- PRESENTACIONES A CONGRESOS Y REUNIONES CIENTÍFICAS Guardia, C. M., Gauto, D. F., Di Lella, S., Rabinovich, G. A., Estrin, D. A., Martí, M. A. Comparison of structural, dynamical and protein-carbohydrate interaction properties of human galectins. Presentación de póster. International Society of Computational Biology Latin-America Congress, Montevideo, Uruguay, 13 al 16 de Marzo de 2010.
- Di Lella, S., Martí, M. A., Estrin, D. A. Solvent occupancy analysis in ligand structure prediction. Presentación de póster. *Structure and Dynamics of Hydrogen-bonded Systems*, International Centre for Theoretical Physics, Trieste, Italia, 26 y 27 de octubre de 2009.
- Gauto, D. F., Di Lella, S., Guardia, C. A. M., Estrin, D. A., Mónaco, H., Martí, M. A. Carbohydrate-binding proteins: Dissecting ligand structures through solvent environment occupancy. Presentación de póster. VII Congreso Iberoamericano de Biofísica, Buzios, Brasil, septiembre de 2009.
- Di Lella, S., Martí, M. A., Estrin, D. A. Solvent occupancy analysis in ligand structure prediction: the case of Galectin-1. Presentación en exposición oral. *7th EBSA European Biophysics Congress*, Genova, Italia, 11 al 15 de julio de 2009.
- Di Lella, S., Martí, M. A., Díaz Ricci, J. C., Estrin, D. A., Rabinovich, G. A., Álvarez, R. M. Impacto de la unión de lactosa en la estructura y termoestabilidad de galectina-1. Presentación en exposición oral. XVI Congreso Argentino de Físico-Química y Química Inorgánica, Salta, 18 al 21 de mayo de 2009.

Di Lella, S., Martí, M. A., Díaz Ricci, J. C., Estrin, D. A. To be or not to be (bound): Impact of ligand binding on galectin-1 structure and thermal stability. Presentación de póster. *49th Sanibel Symposium*, St. Simon Island, Georgia, Estados Unidos, 25 de febrero al 3 de marzo de 2009.

Gauto, D. F., Di Lella, S., Guardia, C. A. M., Estrin, D. A., Martí, M. A. Rol de las aguas fuertemente ligadas en proteínas que unen carbohidratos. Presentación de póster. XXXVII Reunion Anual de la Sociedad Argentina de Biofísica. La Plata, Buenos Aires, diciembre de 2008.

Di Lella, S., Martí, M. A., Díaz Ricci, Álvarez, R. M., J. C., Estrin, D. A. What does solvent occupancy tell us about ligand binding in h-galectin-1? Presentación de póster. *VI International Conference of Biological Physics* y XXXVI Reunión Anual de la Sociedad Argentina de Biofísica, Montevideo, República Oriental del Uruguay, 27 al 31 de agosto de 2007.

Bikiel, D. E., Di Lella, S., Signorella, S., Estrin, D. A. Estudio teórico de mecanismos de dismutación de H₂O₂ por complejos biomiméticos bimetálicos de Mn. Presentación de póster. XV Congreso Argentino de Físico-Química y Química Inorgánica, Tandil, Buenos Aires, 19 al 23 de abril de 2007.

Di Lella, S., Martí, M. A., Estrin, D. A., Díaz Ricci, J. C. Characterization of the water sites in the carbohydrate recognition domain of galectin-1. Presentación de póster. XXXV Reunión Anual de la Sociedad Argentina de Biofísica, Rosario, Santa Fé, 8 al 10 de noviembre de 2006.

Di Lella, S., Martí, M. A., Estrin, D. A., Díaz Ricci, J. C. Thermodynamics of water molecules around the carbohydrate recognition domain of galectin-1. Presentación de póster. *8th Giambiaggi Winter School - Part A: Clusters, Molecules, Biomolecules and Materials*, Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Buenos Aires, 24 al 28 de julio de 2006.

Di Lella, S., Martí, M. A., Estrin, D. A., Díaz Ricci, J. C. Propiedades de las moléculas de agua en el dominio de reconocimiento de carbohidratos de galectina-1. Presentación en exposición oral. Workshop de Metaloproteínas y Complejos de Coordinación Biomiméticos, San Nicolás, Buenos Aires, 17 y 18 de julio de 2006.

Petruk, A. A., Di Lella, S., Farías, R. N., Álvarez, R. M. Cambios conformacionales de 3,5,3'-L-triiodotironina en medio lipídico. Presentación de póster. XXXIV Reunión Anual de la Sociedad Argentina de Biofísica, Carlos Paz, Córdoba, noviembre de 2005.

SEMINARIOS DICTADOS

“Solvent environment on the study of galectin-1 function, structure and thermal stability”. National University of Ireland, Galway, Irlanda, agosto de 2009.

“Solvent environment on the study of galectin-1 function, structure and thermal stability”. Instituto di Biofísica, Consiglio Nazionale delle Ricerche, Palermo, Italia, julio de 2009.

“On the role of water molecules in ligand binding. A molecular study of galectin-1”. Quantum Theory Project, University of Florida, Gainesville, Florida, Estados Unidos, enero de 2008.

“Unión galectina-1-lactosa: una mirada microscópica”. Laboratorio de Inmunopatología, Instituto de Biología y Medicina Experimental, Conicet. Buenos Aires, julio de 2008.

“Termodinámica de sitios de agua en la estructura de galectina-1 humana”. Instituto Superior de Investigaciones Biológicas, Conicet-Universidad Nacional de Tucumán, mayo de 2007.

“Estudio termodinámico del solvente en el dominio de reconocimiento de carbohidratos de galectina-1”. Instituto de Química-Física, Facultad de Bioquímica, Química y Farmacia, Universidad Nacional de Tucumán, julio de 2006.

EXPERIENCIA DOCENTE	<p>Universidad de Buenos Aires, Argentina <i>Facultad de Ciencias Exactas y Naturales</i> <i>Docente Auxiliar</i> Períodos 2008 - 2009 Maestría en Biología Molecular Médica. Materia: Biología Computacional.</p> <p><i>Auxiliar Docente de 1ª Categoría</i> Octubre de 2006 - Febrero de 2008 Departamento de Química Inorgánica, Analítica y Química-Física. Materias: Físicoquímica I, Físicoquímica II, Química General e Inorgánica I.</p> <p>Universidad Nacional de Tucumán, Argentina <i>Facultad de Bioquímica, Química y Farmacia</i> <i>Auxiliar Docente de 2ª Categoría</i> Mayo de 2002 - Agosto de 2004 Instituto de Química Biológica "Dr. Bernabé Blöj". Materias: Química Biológica I y Química Biológica II.</p>
PARTICIPACIÓN EN DICTADO DE CURSOS DE POSGRADO	<p>"Computational Modelling and Simulations of Biological Systems". Institut Pasteur de Montevideo, Montevideo, Uruguay, 22 de Febrero al 5 de Marzo de 2010.</p> <p>"Métodos de Simulación Híbridos Cuántico-Clásicos (QM-MM)". Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Nacional de Córdoba, Córdoba, Argentina, 15 al 19 de Febrero de 2010.</p>
ACTIVIDADES DE EVALUACIÓN	<p>Revisor de artículos científicos invitado por los editores de las revistas: - <i>Journal of Physical Chemistry B</i>, de la <i>American Chemical Society</i> - <i>Protein and Peptide Letters</i>, <i>Bentham Science Publisher</i></p>
CURSOS DE POSGRADO APROBADOS	<p>Universidad Nacional de Tucumán, Argentina <i>Programa de posgrado en Ciencias Químicas - Facultad de Bioquímica, Química y Farmacia</i> "Aportes de la bionformática en la predicción de la estructura tridimensional de proteínas. Implicaciones en el diseño de nuevos fármacos". Organizado por la Universidad Internacional de Andalucía. 100 horas. Octubre de 2008.</p> <p>"Estructura y dinámica de biomoléculas autoorganizadas". 60 horas. Marzo de 2008.</p> <p>"Fundamentos de Fotoquímica Moderna". 60 horas. Marzo de 2007.</p> <p>"Química Medicinal Computacional". 60 horas. Marzo de 2006.</p> <p>"Espectroscopía vibracional aplicada a sistemas biológicos". 60 horas. Septiembre de 2005.</p> <p>"Simulación Computacional en Química". 40 horas. Mayo de 2005.</p> <p>Universidad de Buenos Aires, Argentina <i>Departamento de Química Inorgánica, Analítica y Química-Física, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales</i> "Termodinámica". 160 horas. Julio de 2007.</p> <p>Universidad de Talca, Chile <i>Departamento de Modelado Molecular</i> "QM/MM Methods and Quantum Dynamics". 60 horas. Septiembre de 2005.</p>
PASANTÍAS EN EL EXTERIOR	<p>Quantum Theory Project, University of Florida, Gainesville, Estados Unidos. Dirección: Dr. Adrián</p>

Roitberg. Enero de 2008.

Department of Chemistry, University of Pittsburgh, Pennsylvania, Estados Unidos. Dirección: Dr. Sanford A. Asher. Septiembre a diciembre de 2007.

Departamento de Química, Universidade Federal de Minas Gerais, Belo Horizonte, Minas Gerais, Brasil. Dirección: Dra. Maria Helena Araújo. Julio a diciembre de 2004.

FORMACIÓN DE RECURSOS HUMANOS Supervisor de estadia de investigación de Matthias Schneider, becario DAAD en el Departamento de Química Inorgánica, Analítica y Química-Física, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Buenos Aires. Buenos Aires, febrero a julio de 2009.

PARTICIPACIÓN EN PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN “Proteínas que unen carbohidratos: rol de las moléculas de agua en la interacción proteína-ligando”. Miembro del equipo. Agencia Nacional de Investigaciones Científicas y Tecnológicas, PICT-Raíces, 2009-2012.

“Simulación computacional de reactividad química y estructura de biomoléculas”. Miembro del equipo. Universidad de Buenos Aires, 2008-2010.

“Estudios estructurales por espectroscopía vibracional de moléculas de interés biológico”. Miembro del equipo. CONICET, 2006-2009.

“Estudios estructurales de moléculas biológicas y sustancias sulfonitrogenadas y fosfonitrogenadas”. Miembro del equipo. Consejo de Investigaciones, Universidad Nacional de Tucumán, 2004-2008.

IDIOMAS Español. Nativo.

Inglés. Dominio oral y escrito.

Portugués. Dominio oral y escrito.

Alemán. Elemental.

ACTIVIDADES DE EXTENSIÓN Coordinador del Programa Proquimia en la Ciudad de Buenos Aires, dependiente del Programa Olimpiada Argentina de Química. Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Buenos Aires, Ciudad de Buenos Aires, desde junio de 2009.

Docente auxiliar en el programa para alumnos de escuelas medias “Taller de Química”, organizado por la Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Buenos Aires, y la Cámara Argentina de la Industria Química. Ciudad de Buenos Aires, julio de 2007 y octubre de 2008.

Coordinador de delegaciones extranjeras en las XIII Jornadas de Jóvenes Investigadores de la Asociación de Universidades Grupo Montevideo, Universidad Nacional de Tucumán, agosto-septiembre de 2005.

Practicante Agregado a la cátedra de Práctica Hospitalaria, para la Guardia Bioquímica del Hospital del Niño Jesús. San Miguel de Tucumán, junio a noviembre de 2002.

REFERENCIAS Dr. Darío A. Estrin
Facultad de Ciencias Exactas y Naturales - UBA
Investigador Principal - Conicet
dario@qi.fcen.uba.ar

Dr. Juan Carlos Díaz Ricci
Facultad de Bioquímica, Química y Farmacia - UNT
Investigador Independiente - Conicet
juan@fbqf.unt.edu.ar

Dr. Rosa M. Álvarez
Facultad de Bioquímica, Química y Farmacia - UNT
Investigadora Adjunta - Conicet
mysuko@fbqf.unt.edu.ar

Dr. Adrián Roitberg
Quantum Theory Project - University of Florida
Senior Editor - Journal of Physical Chemistry B
roitberg@qtp.ufl.edu

Dr. Gabriel A. Rabinovich
Instituto de Biología y Medicina Experimental
Investigador Principal - Conicet
gabyrabi@ciudad.com.ar