

CURRICULUM VITAE - DARIO ESTRIN

Datos Personales:

Fecha nacimiento: 25-04-1962

Domicilio: Ruiz Huidobro 3377, C1428EHA, Buenos Aires, Argentina

Teléfono: particular 11-4541-6370, laboral 54-11-4576-3378 , ext. 105.

Fax: 54-11-4576-3341

DNI:14933693, CUIL: 20-14933693-2

e-mail: dario@qi.fcen.uba.ar

Grados académicos

Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Buenos Aires, Licenciado en Química (1985)

Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de La Plata, Doctor en Ciencias Químicas (1989)

Antecedentes docentes

- **2009 - Profesor Titular Regular, Departamento de Química Inorgánica, Analítica y Química Física (DQIAQF), Facultad de Ciencias Exactas y Naturales (FCEN), UBA.**
- 2001 – Profesor Asociado Regular, Departamento de Química Inorgánica, Analítica y Química Física, DQIAQF, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales (FCEN), UBA.
- 1996-2001 Profesor Adjunto Regular con dedicación exclusiva, DQIAQF, FCEN, UBA.
- 2005, Profesor Invitado, Universidad de Tucumán, Curso de Modelado Molecular.
- 2004, Profesor Invitado, Universidad de Pamplona, Colombia.
- 1997 - Docente Invitado, International Center for Theoretical Physics (ICTP)- UNESCO, Trieste , Italia, Spring College in Computational Physics
- 1994-1996 Jefe de Trabajos Prácticos, DQIAQF, FCEN, UBA.
- 1994-1996 Curso de capacitación para profesores de enseñanza media
Uniones químicas, Ministerio de Cultura y Educación, Olimpíadas de Química
- 1988-1989 Jefe de Trabajos Prácticos, DQIAQF, FCEN, UBA.
- 1983-1989 Ayudante de Segunda y Ayudante de Primera, Departamentos de Química Orgánica y DQIAQF, FCEN, UBA.

Antecedentes de Investigación

- 2006- Investigador Principal CONICET
- 2002-2006 Investigador Independiente CONICET
- 1998 - 2002 Investigador Adjunto CONICET.
- 1994-1998 Investigador Asistente CONICET.
- 1992-1994 Investigador Senior, Centro di Ricerca, Sviluppo e Studi Superiori di Sardegna (CRS4).
- 1989-1991 Investigador post-doctoral The Ohio State University
- 1988-1989 Investigador Laboratorios Beta, Buenos Aires.

Proyectos de Investigación y Desarrollo

Fundación Antorchas:

Titular de los siguientes proyectos:

Colaboración con grupos extranjeros: 2004, 2003, 2001

Apoyo a proyectos de investigación : 2002, 1999, 1997, 1996

Científicos jóvenes : 1995

Colaboración Argentina-Brasil : 1996, 1995

Reinstalación de becarios externos: 1994

Universidad de Buenos Aires:

Titular de los siguientes proyectos:

Bienal 2006-2007

Bienal: 2004-2005

Bienal tipo B:2001-2002

Trienal 1998-2000

Investigadores jóvenes: 1996-1997

CONICET

Titular de los siguientes proyectos:

Plurianual 2008-2011

Plurianual 2005

Plurianual PIP 2001

Estímulo a la investigación: 1997

ANPCYT

Titular proyecto PICT Raices 2008-2011

Titular proyecto PICT 2006-2008

Titular proyecto tipo B, 2001-2004

SECYT

Proyecto colaboración internacional Argentina-Italia, 2002-2003.

Proyecto colaboración internacional Argentina-Colombia, 2009-2010.

Unión Europea

Titular grupo argentino en subsidio Framework Program 7 . 2008-2011

Antecedentes de Evaluación y Gestión.

- Revisor de artículos del Journal of Physical Chemistry, Journal of the American Chemical Society, Chemical Reviews, Accounts of Chemical Research, Journal of Chemical Theory and Computation, Inorganic Chemistry, Journal of Medicinal Chemistry (American Chemical Society), Canadian Journal of Chemistry, Chemical Physics Letters, Theoretical Chemistry Accounts, Journal of Inorganic Biochemistry, Brazilian Journal of Chemistry, Journal of Chemical Physics, Biophysical Journal, Biophysica Biochimica Acta (Biomembranes), Protein Engineering, Design, and Selection (Oxford Journals), Soft Matter (Royal Society), Biochemistry, ChemMedChem (Wiley), Proteins (Structure, Function and Bioinformatics), ChemPhysChem, Physical Chemistry Chemical Physics (PCCP), Biochimie, IUBMB Life, European Physics Letters, Advances in Inorganic Chemistry.

Evaluador Agencia Española de Ciencia, Universidad de la República (Uruguay), Human Frontiers for Science Grants, European Science Foundation, American Chemical Society Petroleum Research Foundation.

Miembro de la comisión asesora de Ciencias Químicas del CONICET, 2003-2005

• Jurado tesis doctorado

- Octubre 2009. Ofelia Oña. Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, UBA.
- Julio 2009. Gustavo Pierdominici. Universidad de Quilmes.
- Marzo 2009. Javier González. Universidad de Rosario.
- Marzo 2009. Oscar Oviedo. Universidad de Córdoba.
- Diciembre 2008. Pablo Dans. Universidad de la República, Montevideo, Uruguay.
- Noviembre 2008. Ariel de Candia, Departamento de Química Inorgánica, Analítica y Química Física, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, UBA.
- Junio 2008 Sandra Maguid, Universidad de Quilmes
- Junio 2008, Marcelo Mariscal, Universidad de Córdoba
- Febrero 2008, Ben Samuelson-Jones, Albert Einstein College of Medicine, New York, USA
- Noviembre 2006, Patricia Saenz, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay.
- Abril 2006 Claudia González - Depto de Física, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, UBA
- Mayo 2003 Veronica Barone - Depto de Física, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, UBA
- Abril 2002 Juan Peralta - Depto de Física, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, UBA
- Agosto 2000 María del Carmen Michelini - Depto de Química, Facultad de Ciencias Exactas, Universidad de La Plata.
- Agosto 1999 Ricardo Gómez Abal - Depto de Física, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales – UBA.
- Octubre 1998 Javier Guevara - Depto de Física, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales – UBA.

Jurado en diversas ocasiones de Concursos Profesores en Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, UBA, Universidad Nacional de Quilmes, Universidad Nacional de Córdoba.

Jurado Concurso director CEQUINOR, Conicet-Universidad de La Plata, Noviembre 2008.

- Evaluador
Proyectos Plurianuales, ingresos y promociones carrera investigador, CONICET
- 1998-1999 Responsable Convenio PERMATEC S.A y Fundación Ciencias Exactas.

Desarrollo de modelos computacionales de permeación por piel.

- Jurado Concurso Regular de Jefes de Trabajos Prácticos
Departamento de Química Inorgánica, Analítica y Química Física - FCEN –UBA, Diciembre 1998.
- **Jurado tesis licenciatura**
Marzo 2004, Nicolas di Fiori, Depto de Física, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales – UBA
Agosto 2004, Ofelia Oña, Depto de Física, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales - UBA
Diciembre 1998 Daniel Zaccari - Depto de Física, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales - UBA
Diciembre 1997 María Dolores Demarco - Depto de Física, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales - UBA
- Jurado Selección Interina de Jefes de Trabajos Prácticos
Departamento de Química Inorgánica, Analítica y Química Física - FCEN -UBA
Agosto 1998

Evaluador de Categorización del Programa de Incentivos. Región Sur. 2004.

Miembro del Comité Científico del Congreso Argentino de Fisicoquímica y Química Inorgánica, Tandil, 2007.

Miembro del Comité Científico Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina, QUITEL, La Habana, 2007.

Idiomas

Inglés e italiano

Premios y Distinciones

- Ciudadano destacado de la Ciencia, Legislatura de la Ciudad de Buenos Aires, 2008.
- Becario Fundación John Simon Guggenheim, 2007.
- Premio Houssay a investigadores jóvenes en la disciplina Química
Secretaría de Ciencia y Técnica, 2003.
- IBM-Lowdin Fellowship, Organizadores Sanibel Symposium, Universidad de Florida, 2002
- Premio Ranwell Caputo a la trayectoria de investigadores menores de 40 años en Fisicoquímica,
Academia Nacional de Ciencias, Córdoba, Argentina, 2001
- 1998-2005 Miembro Asociado Regular del International Center for Theoretical Physics (ICTP),
dependiente de las Naciones Unidas, Trieste, Italia.
- Premio a la Producción Científica y Tecnológica
Universidad de Buenos Aires, 1994, 1995.
- Premio "Luis Berdoy" al mejor promedio en licenciaturas en Química

Asociación Química Argentina, 1986.

Actuación Universitaria

- 2002-2006 Miembro del Consejo Directivo de la Facultad de Ciencias Exactas y Naturales por el claustro de profesores.
- 2000 Miembro de la Comisión de Pautas Presupuestarias, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, UBA.
- 1999-2004 Miembro del Consejo Departamental del Departamento de Química Inorgánica, Analítica y Química-Física.
- 1997 - 1998 Director Adjunto del Departamento de Química Inorgánica, Analítica y Química-Física.
- 1994- Representante del INQUIMAE en la comisión interdepartamental de Redes de la FCEN-UBA
- 1994- 1997 Representante del INQUIMAE y del Departamento de Química Inorgánica, Analítica y Química-Física en la comisión interdepartamental de Biblioteca de la FCEN-UBA.
- 1994- Responsable de la instalación y de la administración de las redes de computadoras internas del INQUIMAE y el DQIAQF.

Tesis dirigidas:

(Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, UBA)

1. Damián E. Bikiel. Director tesis doctorado en Química. Septiembre 2009. Calificación sobresaliente.
 2. Pablo de Biase. Director Tesis doctorado en Química. Diciembre 2008. Calificación sobresaliente.
 3. Laura Perissinotti. Director Tesis de doctorado en Química. Diciembre 2007. Calificación: sobresaliente.
 4. Marcelo Marti. Director Tesis de doctorado en Química. Diciembre 2006. Calificación: sobresaliente.
 5. Mariano González Lebrero. Director Tesis doctorado en Química. Marzo 2006. Calificación: sobresaliente.
 6. Alejandro Crespo. Director Tesis doctorado en Química. Marzo 2006. Calificación: sobresaliente.
 7. Adrián Turjanski. Director Tesis doctorado en Química. Marzo 2003. Calificación: sobresaliente.
 8. Damian Scherlis. Director Tesis doctorado en Química. Mayo 2002. Calificación: sobresaliente.
 9. Dolores Elola. Codirector Tesis doctorado en Física. Noviembre 2002. Calificación: sobresaliente.
 10. Javier Rodríguez. Codirector Tesis doctorado en Química. Diciembre 2002. Calificación: sobresaliente.
-
1. Martin Fraiman. Director Tesis licenciatura en Física. Abril 2008. Calificación: 10.
 2. Leonardo Boechi. Director Tesis licenciatura en Biología. Abril 2006. Calificación: 10.
 3. Alvaro Carrera. Codirector Tesis licenciatura en Física. Marzo 2005. Calificación: 10.
 4. Pablo de Biase. Codirector Tesis licenciatura en Biología. Octubre 2003. Calificación: 10.
 5. Marcelo Martí. Director tesis licenciatura en Biología. Diciembre 2002. Calificación: 10.
 6. Eliana Ascitutto. Director Tesis licenciatura en Física. Noviembre 2001. Calificación: 10
 7. Dolores Elola. Director Tesis licenciatura en Física. Junio 1997. Calificación: 10
 8. Patricia Hamra. Codirector Tesis licenciatura en Física. Septiembre 2002. Calificación: 10.

Seminarios y Conferencias dictadas por invitación.

- Exploring Structure, Dynamics, and Chemical Reactivity of Heme Proteins using Computer Simulation, VII Iberoamerican Congress of Biophysics, Buzios, Brasil, Septiembre 2009.
- Simulación computacional de reactividad química de hemoproteínas, XXXV Quitel (Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina), San Andrés, Colombia, Septiembre 2009.
- Computer simulation of ligand binding and reactivity of heme proteins, European Biophysical Society Meeting, Genova, Italia, Julio 2009.
- Understanding the NO detoxification mechanism in truncated hemoglobin N from *M. Tuberculosis*: a QM-MM and classical simulation study, Sanibel 2009 Meeting, Febrero 2009.
- Simulación computacional de biomoléculas, Facultad de Medicina, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay, Mayo 2008.
- *Computer simulation of chemical reactivity of heme proteins*, Albert Einstein College of Medicine, Ieshiva University, Department of Physiology and Biophysics, February 2008.
- *Computer simulation of chemical reactivity of heme proteins*, Institute of Protein Biochemistry, CNR, Napoli, Italy, February 2008.
- *QM/MM and classical simulations of heme proteins*, XII School of Biophysics (Italian Biophysical Society) The ever changing world of globins, Venice, Italy, February 2008.
- *QM/MM investigation of chemical reactivity of heme proteins*, 2nd Center for Molecular Modeling Workshop on QM-MM simulations, Philadelphia, USA, Agosto 2007.
- *Chemical reactivity of heme proteins*
13th International Workshop on Computational Physics and Materials Science: Total Energy and Force Methods, January 2007.
- *Computer simulation of ligand binding and migration in globins*
II XV Internacional Conference on Dioxygen Binding and Sensing Proteins, Nápoles, Italia, Septiembre 2006.
- *Computer simulation of chemical reactivity in proteins and in solution*
II Reunión Nacional de Modelización Molecular y Quimioinformática, Barcelona, España, Junio 2005.

- *Simulación computacional de reacciones químicas en proteínas*
XXXIV Reunión Anual Sociedad Argentina de Biofísica, Villa Carlos Paz, Noviembre 2005,
- *QM-MM investigation of chemical reactivity of heme proteins*
Conferencia invitada en el simposio: Quantum-classical calculations in Chemistry and Biophysics
American Chemical Society 228th National Meeting, Filadelfia, agosto 2004.
- *Simulación computacional de reactividad química en hemoproteínas*
Conferencia invitada
XXVIII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina, Montevideo, Uruguay, Septiembre 2002.
- *Simulación computacional de reactividad química en hemoproteínas*
Seminario invitado
Facultad de Farmacia, Universidad de Barcelona, Octubre 2002.
- *Environment effects on chemical reactivity of heme proteins*
Charla plenaria, 42th Sanibel Symposium, Florida, USA, Febrero 2002.
- *Simulación computacional de reactividad química de hemoproteínas*
Charla semiplenaria en el XII Congreso Argentino de Fisicoquímica y Química Inorgánica, San Martín de los Andes, Argentina, Abril 2001.
- *DFT investigation of the reactivity of heme enzymes*
Istituto per le applizzazioni interdisciplinari della Fisica, CNR, Palermo, Italia, Junio 2000.
- *Teoría de los funcionales de la densidad con bases localizadas: fundamentos y aplicaciones*
Universidad Nacional de Córdoba, Facultad de Ciencias Químicas
Córdoba, Argentina, Diciembre 1998.
- *Modelado Molecular: fundamentos y aplicaciones*
Universidad Nacional del Litoral, Facultad de Ingeniería Química
Santa Fe, Argentina, Noviembre 1998.
- *Hybrid Quantum-Classical Simulations with Fluctuating Charge Potentials*
Workshop on Hybrid Quantum-Classical Methods Centre Europeen de Calcul Atomique and Moleculaire (CECAM), Lyon, Francia, Junio 1998.
- *DFT and Classical MD Simulations of Small Water Clusters*
International Center for Theoretical Physics, Trieste, Italia, Junio 1997.
- *Aplicaciones de la teoría de los funcionales de la densidad en Química*
Departamento de Química Orgánica, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Buenos Aires, Abril 1997.
- *Teoría de los funcionales de la densidad con bases localizadas. Fundamentos y aplicaciones.*
Departamento de Física, Comisión Nacional de Energía Atómica, Junio 1996.
- *Solvent effects in DFT calculations* (conferencia plenaria invitada)
Second International Congress on Theoretical Chemical Physics, New Orleans, USA, 1996.

- *DFT calculations on small water clusters*
Ohio State University, Chemistry Department, Physical Chemistry Seminar
Columbus, Ohio, USA, Julio 1995.
- *DFT calculations on small water clusters*
Philipps Universitat Marburg - Fach Physikalische Chemie
Marburg, Alemania, Agosto 1995.
- *Ab-initio Molecular Dynamics*
DFT calculations in systems of biological interest
Universidade Federal Fluminense, Instituto de Química, Niteroi, RJ, Brasil, Marzo 1995.
- *A gaussian basis set implementation: theory and applications*
Freie Universitat Berlin, Institut für Physikalische und Theoretische Chemie
Berlin, Alemania, Julio 1994.
- *El programa DFT-Molecole: fundamentos y aplicaciones*
Programa QUINOR
Universidad Nacional de La Plata, Facultad de Ciencias Exactas, Mayo 1994
- *Il programma DFT-Molecole: teoria ed applicazioni*
Istituto di Chimica Quantistica e Molecolare (CNR)
Università di Pisa, Italia, Octubre 1993.
- *DFT-Molecole : a Gaussian basis set implementation*
Universidad Louis Pasteur, Strasbourg, Francia, Marzo 1993.
- *Coupled classical-quantum methods*
Università di Palermo (Italia), Istituto di Fisica, Octubre 1992.
- *A DFT approach for coupled classical-quantum simulations*
Symposium 'Numeric Intensive Computations in Chemistry and Physics'
Cagliari – Italia, Septiembre 1992.
- *Simulaciones en Van der Waals clusters*
Universidad de Chile - Facultad de Ciencias
Santiago de Chile - Chile, Diciembre 1991.
- *A simulated annealing strategy for condensed phase simulations*
University of Illinois at Chicago - Dept of Chemistry, Chicago, USA, Febrero 1991

Participación en Conferencias:

- **VII Iberoamerican Congress of Biophysics, Buzios, Brasil, Septiembre 2009.**
 - Comparison of structural, dynamical, and protein carbohydrate interaction properties of human galectin*
 - Molecular basis for the differential reactivity of copper sites in PHM*
 - Together is better: physical interaction of NGF receptors TRKA and P75*
- **XXXV Quitel, Conferencia de Químicos Teóricos de Expresión Latina, San Andrés, Colombia, Septiembre 2009.**
 - Estudiando las bases moleculares de la afinidad de ligandos en hemoglobinas truncadas*
 - Intrigante red de puentes de hidrógeno en la trHb-P oxigenada de Campylobacter Jejuni: it takes three to tango*
 - Role of heme distortion on the unusual oxygen affinity of protoglobin*
- **XVth International Conference on Oxygen Binding and Sensing Proteins, Aarhus, Dinamarca, Agosto 2008.**
 - Structural determinants for globin hexacoordination. A comparison between myoglobin and neuroglobin.*
 - Product release in NO detoxification by Mycobacterium tuberculosis truncated hemoglobin N*
 - A microscopic study of the deoxy hemoglobin catalyzed generation of nitric oxide from nitrite anion*
 - Structural and dynamical characterization of the hemoglobin from a sub-Antartic fish cottoperca gobbio*
- **6th Internacional Conference on Biological Physics, Montevideo, Uruguay, Septiembre 2007.**
 - What does solvent occupancy tell us about ligand binding in Galectin 1?*
 - Hybrid QM-MM investigation of the vibrational spectra of nitrogen reactive species in aqueous solution*
 - Dioxygen affinity in heme proteins investigated by computer simulation*
 - Exploring the molecular basis of heme hexacoordination by means of molecular dynamics simulations*
 - The mechanism of nitrite reduction to NO by deoxy hemoglobin investigated by computer simulation*
 - NO release from nitrophorin 4 of Rhodnius Prolixus: bond or cage effect?*
- **XV Congreso Argentino de Fisicoquímica y Química Inorgánica, Tandil, Abril 2007.**
 - Estudio de la estructura del producto de la reacción de HNO y O₂, mediante cálculos QM/MM: espectros vibracionales en solución acuosa.*
 - Estudio teórico de mecanismos de dismutación de H₂O₂ por complejos biomiméticos bimetálicos de Mn*
 - Efecto Stark Vibracional de mesocianoporfirina*
 - Estudio de los posibles mecanismos de reducción de nitrito por la deoxy-Hemoglobina para dar óxido nítrico*
 - Estudio estructural comparativo de dos globinas recientemente descubiertas: la neuroglobina y la citoglobina.*
 - Efecto del campo eléctrico en porfirinas adsorbidas*
- **XXXV Reunión Anual de la Sociedad Argentina de Biofísica, Rosario, Nov. 2006**
 - Multiple conformations in heme proteins: a new mechanism for ligand binding control*
 - Computational study of the truncated hemoglobin O from Mycobacterium Tuberculosis: exploring the relation between structure and function*
 - Heme protein oxygen affinity regulation exerted by proximal effects*
 - Characterization of water sites around the carbohydrate recognition domain of Galectin 1*
 - The role of the meso substitution of the active site on the catalytic activity of the hydroxylamine*

Oxidoreductase

A theoretical study of the PH dependent affinity for NO and O₂ in nitrophorin 4

MD simulation of the adsorption process of cytochrome c on self assembled monolayers

- XIV Congreso Argentino de Fisicoquímica y Química Inorgánica, Termas de Río Hondo, Abril 2005.
Estructura y polaridad de clusters (H₂O)_n y KI(H₂O)_n. *Deflexión eléctrica de haces moleculares y simulación computacional*
Cómo obtener perfiles de energía libre de reacciones en solución y no morir en el intento. Un desafío para la simulación computacional
Control de procesos de transferencia de carga
Estudio del efecto de campos eléctricos sobre la reactividad de ligandos diatómicos coordinados a metaloporfirinas y hemoproteínas.
Simulación computacional de perfiles de energía libre en procesos enzimáticos
Bases moleculares de la reactividad de hemoproteínas.
Un nitrosilo atípico pentacloronitrosiliridato(III) de tetrafenilfosfonio
Nitrosación de aminas alifáticas con el nitrosilo extremadamente reactivo
- 45 Sanibel Symposium, Saint Simons Island, Georgia, Marzo 2005.
Multiple steering molecular dynamics free energy profiles in biological systems. Applications to chorismate mutase and truncated hemoglobin.
- 228th American Chemical Society National Meeting, Philadelphia, Agosto 2004.
Solvent effects on the reaction of peroxyxynitrite and carbon dioxide
- 1er Workshop Argentino de Química Bioinorgánica, Rosario, Julio 2004.
Estudio QM-MM de la interacción del óxido nítrico con citocromo c' y su relevancia para la *guanilato ciclasa soluble*
Trioxodinitrato como dador de nitroxilo: estudios cinéticos y teóricos de su mecanismo de descomposición.
Mecanismo de denitrosación de 1-nitrosomelatonina
Modulación de la inhibición por producto de la enzima óxido nítrico sintasa por el entorno de la cisteína proximal.
Estudio experimental y teórico del mecanismo de transnitrosación entre tioles y nitrosotioles
Estudio teórico del mecanismo de detoxificación del NO por la hemoglobina truncada
Efectos del solvente en la reacción del peroxinitrito con dióxido de carbono
- XIII Congreso Argentino de Fisicoquímica y Química Inorgánica
Bahía Blanca, Abril 2003
Dependencia estructural y del momento dipolar con el tamaño de clusters KI(H₂O)_n: un enfoque teórico y experimental
Estudio experimental y teórico del mecanismo de transnitrosación entre tioles y nitrosotioles
- 43 Sanibel Symposium
Florida, USA, 2003
A New DFT/QM-MM Approach Designed for the Treatment of Large Molecular Systems: Insights and Applications

- XXVIII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina
Montevideo, Uruguay, septiembre 2002
Espectros electrónicos y de EPR de radicales indólicos: un estudio DFT
Ruptura de la simetría del ion nitrato inducida por solvatación en nanoagregados acuosos: un estudio QM-MM
Modulación del efecto trans negativo del NO en hemoproteínas
- International Union for Pure and Applied Biophysics
Buenos Aires, Abril 2002
Calmodulin-Melatonin interaction: an experimental and computational study
Modulation of NO trans effect on Heme Proteins: Implications in Guanylate Cyclase Activation
- XX International Conference on Magnetic Resonance in Biological Systems
Toronto, August 2002
NMR and Molecular Dynamics Study of the Interaction of Melatonin with Calmodulin
- XV National Congress of the Italian Society for Pure and Applied Biophysics
Italia, August 2002
NMR and Molecular Dynamics Study of the Interaction of Melatonin with Calmodulin
- 42 Sanibel Symposium
Florida, USA, 2002
Symmetry breaking and vibrational spectrum of NO in aqueous clusters: a QM-MM study
- 2001 XLVI Reunión Anual de la Sociedad Argentina de Investigación Clínica
Mar del Plata, Argentina, noviembre 2001
Efecto de la melatonina sobre el sistema nitrgico en la retina del hámster dorado
- 9th International Conference on the Applications of the Density Functional Theory in Chemistry and Physics
Madrid, España, Septiembre 2001
Hydrogen Bonding and Oxygen Affinity of Hemoglobins
DFT Investigation of Indolyl Radical and Radical cations
- XII Congreso Argentino de Fisicoquímica y Química Inorgánica
San Martín de los Andes, Abril 2001.
Reacción de Melatonina con Oxido Nítrico
Estructura Electrónica y Productos de Reducción del [Fe(CN)NO]
Reacción de 2,2,2trifluoroetilamina con [Ru(bipy)(NO)Cl](PF)
- 85 Reunión Anual de la Asociación Física Argentina
Buenos Aires, Septiembre 2000.
Estructura electrónica, efectos térmicos y cuánticos nucleares en el sistema LiAlH₄
Simulación de reactividad química en hemoproteínas
- DFT2000
Satellite Symposium of the 10 International Congress of Quantum Chemistry
Menton, France, Junio 2000
Hybrid quantum-classical simulations of reactivity in aqueous clusters
Computational Study of the influence of the protein environment on the oxygen affinity of different hemoglobins

- XXXV Reunión Anual de la Sociedad Argentina de Investigación en Bioquímica y Biología Molecular
Mendoza, Noviembre 1999
Estudio Experimental y Computacional de la Interacción de Melatonina con Oxido Nítrico
- 8 International Conference on the Applications of the DFT in Chemistry and Physics
Roma, Italia, Septiembre 1999
Thermal effects on the electrical response of gallium-arsenide clusters
Nitric oxide binding to cytochrome P450: a density functional study
- 84 Reunión de la Asociación Física Argentina
Tucumán, septiembre 1999
Estudio Computacional de la reactividad química del HNO en clusters acuosos
Evolución del magnetismo del Ni en función del entorno: átomo, dímero y aleaciones ordenadas NiCu
(presentación en el área enseñanza de la Física
Impurezas de metales de transición sobre Au(111): interpretación LDA de experimentos STM
- Gordon Research Conference on Organometallic Chemistry
July, 1999
Aliphatic and Aromatic Diazonium Salts stabilized by coordination: an experimental and theoretical study.
- XI Congreso Argentino y I del Mercosur de Fisicoquímica Santa Fe
Abril 1999
Reactividad de HNO₃ en nanoagregados acuosos mediante técnicas de simulación computacional
Estructura y solvatación de [Fe(CN)₅H₂] y [Fe(CN)₅En]
(H₂=hidracina y En=etilendiamina)
Reacciones de melatonina e indoles relacionados con radicales libres: un estudio computacional
Análisis de un proceso enzimático mediante DFT: reacción del óxido nítrico con el grupo hemo en el citocromo P450
- Reunión Nacional de Física 1998, Asociación Física Argentina
Septiembre 1998, La Plata, Argentina
Reactividad Química en medios acuosos mediante técnicas de simulación computacional mixtas cuántico-clásicas
- ISSPIC 9 (Ninth International Symposium on Small Particles and Inorganic Clusters)
Septiembre 1998, Lausanne, Suiza
Isomerization and Melting of Model Water Clusters: [H₂O]₆ and [H₂O]₈
- Proton Transfer in Chemistry and Biology
Agosto 1997, Berlín, Alemania
Simulation of Hydrochloric Acid Dissociation at the Surface of an Ice Film
- X Congreso Argentino de Fisicoquímica
1997, Tucumán, Argentina
Estudio Computacional de la estructura y reactividad en complejos pentaciano(L) ferrato(II) (L=aminas alifáticas y aromáticas)
Estructura, Dinámica y Transiciones de Fase del Cluster (H₂O)₈
Descriptor cuántico de melatonina: Efectos de las propiedades conformacionales y de la solvatación
Estudio Teórico y Experimental de los Efectos de Solvatación en Complejos de Metales de Transición

Estabilidad Térmica de Piridin-Dicarboxilatos de Cobre(II) y Cadmio(II)

- 6 International Conference on the Applications of the Density Functional Theory in Chemistry and Physics
1995 Paris, Francia
Structural Properties and Donor-Acceptor Analysis in Pentacyano and Pentacyano N-Methyl Pyrazine Ferrate (II) (poster)
Electrical response parameters in small water clusters (poster)
- "IX Congreso Argentino de Físicoquímica"
1994 San Luis, Argentina
Efectos del solvente en el complejo $[Fe(CN)_5NO]^{2-}$ (poster)
Determinación de superficies de energías libres para reacciones SN2 en clusters (poster)
Efectos del solvente en cálculos moleculares (conferencia semiplenaria)
- Thirty Years of Density Functional Theory: Concepts and Applications
1994 Cracovia, Polonia
Solvent Effects on Density Functional Calculations of Uracil and Cytosine Tautomerism (poster)
Solvent Effects on Density Functional Calculations of $[Fe(CN)_5NO]^{2-}$ (poster)
- Secondo Convegno Nazionale di Informatica Chimica
1994 Bologna, Italia
A Density Functional Study of Tautomerism of Uracil and Cytosine (poster)
Ab Initio and Density Functional Calculations on the Adenine-Thymine and Cytosine-Guanine DNA Base Pairs (poster)
- 5th International Conference on the applications of the Density Functional Theory in Chemistry and Physics
1993, Como Italia
Density Functional Theory applied to molecules of biological interest (presentación oral)
- Ultrafast Reaction Dynamics and Solvent Effects

1993 Abbaye de Royaumont, Francia
- 1991 American Physical Society Meeting
Cincinnati OH, USA
A Simulated Annealing Strategy for Condensed Phase Electronic Structure Calculations (poster)
- 1991 American Physical Society Meeting
Cincinnati OH, USA
Electronic States of a Guest Atom in Van der Waals Clusters (presentación oral)
- XXIII Midwest Theoretical Chemistry Conference
Mayo 1990, Madison WI, USA
Electronic Structure and Dynamics of a Guest Atom in Van der Waal's Clusters via Simulated Annealing (poster)
- 199 American Chemical Society National Meeting
Abril 1990, Boston MA, USA
Electronic Structure of a Guest Atom in a Van der Waal's Cluster via Simulated Annealing (poster)

- XXXIV Congreso de la Sociedad Argentina de Investigación Clínica
Noviembre 1989, Mar del Plata, Argentina
Design and Bioavailability Study of an Estradiol Transdermal Delivery System (poster)
- XX Reunión Anual de la Sociedad Argentina de Farmacología Experimental
Noviembre 1988, Mar del Plata, Argentina
The First Pass in Transdermal Administration of Estradiol (poster)
- II Congreso Latinoamericano de Cromatografía
Octubre 1988, Buenos Aires, Argentina
Study of Skin Metabolism of Estradiol Using an HPLC Technique (poster)
- XI Congreso de la Sociedad Argentina de Investigaciones Físicoquímicas
Abril 1989, Rio Hondo, Argentina
Treatment of Rotational Quantum Systems (poster)
- XXIII Congreso de la Asociación Física Argentina
Set. 1988, Bariloche, Argentina
Determinación de curvas de energía potencial de moléculas diatómicas usando el método del determinante de Hill (poster)
- X Congreso de la Sociedad Argentina de Investigaciones Físicoquímicas
Abril 1987, Mar del Plata, Argentina
Generalization of the Hill Determinant Method (poster)

Publicaciones (en revistas internacionales con referato)

- 102) *The First Step of the Dioxygenation Reaction Carried Out by Tryptophan Dioxygenase and Indoleamine 2,3-Dioxygenase as revealed by QM/MM Studies*, Capece, L., Lewis-Ballester, A., Batabyal, D., Di Russo, N., Yeh, S., Estrin, D.A., Marti, M.A., *J. Biol. Inorg. Chem.* En prensa.
- 101) *Copper Transfer Mechanism from the Human Chaperone Atox1 to a Metal-Binding Domain of Wilson Disease Protein*, Rodriguez-Granillo, A., Crespo, A., Estrin, D.A., Wittung-Stafshede, P., *J. Phys. Chem. B*, 114, 3698-3706 (2010).
- 100) *Unraveling the molecular basis for ligand binding in truncated hemoglobins: the trHbO B. subtilis case*, Boechi, L., Arroyo Mañez, P., Luque, F.J., Marti, M.A., Estrin, D.A. *Proteins, Structure, Function, and Bioinformatics*, 68, 962-970 (2010).
- 99) *Molecular basis for the electric field modulation of cytochrome c structure and function*, P.M. De Biase, D. Alvarez Paggi, F. Doctorovich, P. Hildebrandt, D.A. Estrin, D.H. Murgida, M.A. Marti, *J. Am. Chem. Soc.* 131, 16248-16256 (2009).
- 98) *Evidence for a Ferryl Intermediate in a Heme-based Dioxygenase*, A. Lewis-Ballester, D. Batabyal, T. Egawa, C. Lu, Y. Lin, M.A. Marti, L. Capece, D. A. Estrin, S. Yeh, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, 106, 17 371-17376 (2009).
- 97) *Carbohydrate-binding proteins: Dissecting ligand structures through solvent environment occupancy*. D.F. Gauto, S. DiLella, C. Guardia, **D.A. Estrin**, M.A. Marti, *J. Phys. Chem. B*, 113, 8717-8724 (2009).
- 96) *High pressure reveals structural determinants for globin hexacoordination: neuroglobin and myoglobin cases*. L. Capece, M. A. Marti, A. Bidon-Chanal, A. Nadra, F. J. Luque, **D. A. Estrin**, *Proteins, Structure, Function and Bioinformatics*, 75, 885-894 (2009).
- 95) *Role of Pre-A Motif in Nitric Oxide Scavenging by Truncated Hemoglobin, HbN, of Mycobacterium Tuberculosis*, A. Lama, S. Pawarta, A. Bidon-Chanal, A. Anand, J.L. Gelpi, S. Arya, M.A. Marti, **D.A. Estrin**, F.J. Luque, K.L. Dikshit, *J. Biol. Chem.* 284, 14457-14468 (2009).
- 94) *The hemoglobins of the sub-Antarctic fish Cottoperca gobio, a phyletically basal species. Oxygen-binding equilibria, kinetics and molecular dynamics*. D. Giordano, L. Boechi, A. Vergara, M.A. Marti, U. Samuni, D. Dantsker, L. Grassi, **D.A. Estrin**, J. Friedman, L. Mazzarella, G. di Prisco, C. Verde, *FEBS Journal*, 276, 2266-2277 (2009).
- 93) *pH dependent mechanism of nitric oxide release in nitrophorins 2 and 4*. J. Swails, Y. Meng, F.A. Walker, M.A. Marti, **D.A. Estrin**, A.E. Roitberg, *J. Phys. Chem. B* 113, 1192-1201, (2009).
- 92) *A molecular basis for the pH dependent structural transition of nitrophorin 4*, M.A. Marti, D.A. Estrin, A.E. Roitberg, *J. Phys. Chem. B*, 113, 2135-2142, (2009).
- 91) *QM-MM investigation of the reaction products between nitroxyl and O₂ in aqueous solution*, C.M.A. Guardia, M.C. González Lebrero, S.E. Bari, **D.A. Estrin**, *Chemical Physics Letters*, 463, 112-116, (2008).
- 90) *Hemisuccinate of 21-Hydroxy-6,19-epoxyprogesterone: A Tissue-specific Modulator of the Glucocorticoid Receptor* L. Alvarez, M.A. Marti, A. Veleiro, R. Misico, **D.A. Estrin**, A. Pecci, G. Burton, *ChemMedChem*, 3,

1869-1877 (2008).

89) *A microscopic study of the deoxy-hemoglobin catalyzed generation of nitric oxide from nitrite anion*, L.L. Perissinotti, M.A. Marti, F. Doctorovich, F.J. Luque, **D.A. Estrin**, *Biochemistry*, 47, 9793-9802 (2008).

88) *Dynamical characterization of the Heme NO Oxygen binding (H-NOX) domain. Insight into soluble guanylate cyclase allosteric transition*. L.Capece, **D.A. Estrin**, M.A. Marti, *Biochemistry*, 47, 9416-9427 (2008).

87) *Structural determinants of ligand migration in M. tuberculosis trHbO*, L. Boechi, M.A. Marti, M. Milani, M. Bolognesi, F.J. Luque, and **D.A. Estrin**, *Proteins, Structure, Function and Bioinformatics*, 73, 372-379 (2008).

86) *Theoretical insight into the hydroxylamine oxidoreductase mechanism*, M.L. Fernandez, **D.A. Estrin**, S.E. Bari, *Journal of Inorganic Biochemistry*, (2008), USA, 102, 1523-1530.

85) *Synthesis, structure and reactivity of aliphatic primary nitrosamines stabilized by coordination to [IrCl5]2-* F. di Salvo, **D.A. Estrin**, F. Doctorovich, *Organometallics* (2008), 27, 1985-1995.

84) *Structural and energetic study of Cisplatin and derivatives: comparison of the performance of DFT implementations*, P. Dans, A. Crespo, **D.A. Estrin**, L.E. Coitiño, *Journal of Chemical Theory and Computation*, (ACS), 4, 740-750 (2008).

83) *A unique family of stable and water soluble S-nitrosothiol complexes*, L. Perissinotti, G. Leitus, L. Shimon, **D.A. Estrin**, F. Doctorovich, *Inorganic Chemistry*, 2008, 47, 4723-4733.

82) *Exploring the Molecular Basis of Action of the Passive Antiglucocorticoid 21-Hydroxy-6,19-epoxyprogesterone*, L. Alvarez, M. Martí, A. Veleiro, D. Presman, **D.A. Estrin**, A. Pecci, G. Burton, *Journal of Medicinal Chemistry*, USA, 2008, 51, 1352-1360.

81) *Mechanism of Product Release in NO detoxification from Mycobacterium tuberculosis Truncated Hemoglobin N*, M. A. Martí, A. Bidon-Chanal, A. Crespo, S. Yeh, V. Guallar, F. J. Luque, **D. A. Estrin**, *Journal of the American Chemical Society*. ISSN 0002-7863, (2008) USA, 130, 1688-1693.

80) *Bond or Cage effect: How Nitrophorins transport and release Nitric Oxide*, M. A. Marti, M. C. Gonzalez Lebrero, A. E. Roitberg, **D. A. Estrin**, *Journal of the American Chemical Society*. ISSN 0002-7863, USA, (2008) 130, 1611-1618.

79) *NO reactivity with globins as investigated through computer simulation* M.A. Marti, L. Capece, A. Bidon-Chanal, A. Crespo, V. Guallar, F.J. Luque, **D.A. Estrin**, *Methods in Enzymology*, (2008) 437, 477-498.

78) *DFT investigation of the binding properties of Fe(II) and Fe(III) substituted porphyrins*, D.E. Bikiel, S.E. Bari, F. Doctorovich, **D.A. Estrin**, *Journal of Inorganic Biochemistry* (2008), 102, 70-76.

77) *HNO trapping and catalytic decomposition of nitroxyl donors by ferric hemes*, S. Suárez, M.A. Marti, P.M. de Biase, S.E. Bari, **D.A. Estrin**, F. Doctorovich, *Polyhedron*, (2007), 26, 4673-4679.

76) *Exploring the molecular basis of heme coordination in human neuroglobin*, A. D. Nadra, M. A. Martí, A. Pesce, M. Bolognesi, **D. A. Estrin**, *Proteins, Structure, Function, and Bioinformatics* (2007), 71, 695-705

75) *QM-MM investigation of the reaction of peroxynitrite with carbon dioxide in water*, M.C. González Lebrero,

D.A. Estrin, Journal of Chemical Theory and Computation (2007), 3, 1405-1411.

74) Electronic perturbation in a molecular wire of $[IrCl_5(NO)]^{2-}$ units F. Di Salvo, N. Escola, F. Requejo, **D.A. Estrin**, D. Scherlis, D. Murgida, F. Doctorovich, Chemistry – a European Journal, in (2007) 13, 8428-8436.

73) Short range and long range solvent effects on charge transfer to solvent transitions of I⁻ and KI contact ion pair dissolved in super critical ammonia G. Sciaini, R. Fernández Prini, **D.A. Estrin**, E. Marceca, Journal of Chemical Physics (2007), 126, 174504.

72) Dynamical regulation of ligand migration by a gate opening molecular switch in truncated hemoglobin N from Mycobacterium Tuberculosis, A. Bidon-Chanal, M.A.Marti, **D.A. Estrin**, F.J. Luque, Journal of the American Chemical Society (2007) 129, 6782-6788.

71) Characterization of the Galectin-1 Carbohydrate Recognition Domain in Terms of Solvent Occupancy S. Di Lella, M.A. Marti, R.M.S. Alvarez, **D.A. Estrin**, J.C. Diaz-Ricci, Journal of Physical Chemistry B (2007), 111, 7360-7366.

70) Oxygen affinity controlled by dynamical distal conformations: the soybean leghemoglobin and the Paramecium Caudatum hemoglobin cases M.A. Marti, L. Capece, D.E. Bikiel, B. Falcone, **D.A. Estrin**, Proteins: Structure, Function, and Bioinformatics (2007), 67, 480-487.

69) Electric field effects on the reactivity of heme model systems, P. M. de Biase, F. Doctorovich, D. H. Murgida, and **D. A. Estrin**, Chemical Physics Letters, (2007) 434, 121-126.

68) Modeling heme proteins using atomistic simulations, D.E. Bikiel, L. Boechi, A. Crespo, P.M. de Biase, S. Di Lella, M.C. González Lebrero, M.A. Marti, A.D. Nadra, L.L. Perissinotti, D.A. Scherlis, **D.A. Estrin**, Physical Chemistry Chemical Physics (invited article) (2006), 8, 5611-5628.

67) Free Energy Calculations with Non-Equilibrium Methods: Applications of the Jarzynski Relationship, H. Xiong, A. Crespo, M. Marti, **D.A. Estrin**, A.E. Roitberg, Theoretical Chemistry Accounts, (2006) 106, 338-346.

66) The Catalytic Mechanism of Peptidylglycine α -Hydroxylating Monooxygenase Investigated by Computer Simulation, A. Crespo, M. A. Marti, A. E. Roitberg, M. Amzel, **D. A. Estrin** Journal of the American Chemical Society. (2006), 128, 12817-12828.

65) Heme protein oxygen affinity regulation exerted by proximal effects., L. Capece, M. A. Marti, A. Crespo, F. Doctorovich, **D. A. Estrin** Journal of the American Chemical Society. (2006), 128, 12455-12461.

64) Dioxygen affinity in heme proteins investigated by computer simulation M.A. Marti, A. Crespo, L. Capece, L. Boechi, D.E. Bikiel, D.A. Scherlis, **D.A. Estrin**, Journal of Inorganic Biochemistry, (2006), 100, 761-770.

63) Ligand-induced dynamical regulation of NO conversion in Mycobacterium tuberculosis truncated-hemoglobin-N A. Bidon-Chanal, M. A. Martí, A. Crespo, M. Milani, M. Orozco, M. Bolognesi, F. J. Luque, **D. A. Estrin**, Proteins: Structure, Function and Bioinformatics (Wiley), (2006), 64, 457-464.

62) A surprisingly stable coordinated nitrosothiol L.L. Perissinotti, **D.A. Estrin**, G. Leitus, F. Doctorovich, Journal of the American Chemical Society (American Chemical Society), (2006) 128, 2512-2513.

61) Proximal effects in the modulation of NO synthase reactivity: a QM-MM study, M.L. Fernández, M.A. Martí, A. Crespo, **D.A. Estrin**, Journal of Biological Inorganic Chemistry (Wiley) (2005) 6, 595-604.

- 60)** *Two distinct distal sites modulate oxygen affinity in minihemoglobin of Cerebratulus Lacteus*, M.A. Martí, D. Bikiel, A. Crespo, M. Nardini, M. Bolognesi, **D.A. Estrin**, *Proteins: Structure, Function and Bioinformatics* (Wiley), (2006) 62, 641-648.
- 59)** *Solvent effects on peroxyxynitrite structure and properties from QM/MM simulations* M.C. González Lebrero, L.L. Perissinotti, **D.A. Estrin**, *Journal of Physical Chemistry A*. (American Chemical Society), (2005), 109, 9598-9604.
- 58)** *Discrimination of Nitroxyl and Nitric Oxide by Water Soluble Mn(III) Porphyrins* M.A. Martí, S.E. Bari, **D.A. Estrin**, F. Doctorovich, *Journal of the American Chemical Society* (American Chemical Society) (2005), 127, 4680-4684.
- 57)** *Nitric Oxide interaction with cytochrome c and its relevance to guanylate cyclase: why does the iron histidine bond break?* M.A. Martí, L. Capece, A. Crespo, F. Doctorovich, **D.A. Estrin**, *Journal of the American Chemical Society* (American Chemical Society) (2005), 127, 7721-7728.
- 56)** *Solvation and Structure of LiAlH₄ in Ethereal Solvents*, D. E. Bikiel, F. di Salvo, M. C. González Lebrero, F. Doctorovich, **D.A. Estrin**, *Inorganic Chemistry* (American Chemical Society) (2005) 44, 5286-5292.
- 55)** *Mechanisms of NO release by N-Nitrosomelatonin: Nucleophilic Attack versus Reducing Pathways*, P. de Biase, A. Turjanski, **D.A. Estrin**, F. Doctorovich, *Journal of Organic Chemistry* (American Chemical Society) (2005) 70, 5790-5798.
- 54)** *Multiple-Steering QM-MM Calculation of the Free Energy Profile in Chorismate Mutase* A. Crespo, M.A. Martí, **D.A. Estrin**, A.E. Roitberg, *Journal of the American Chemical Society* (American Chemical Society) (2005), 127, 6940-6941.
- 53)** *Theoretical Study of the Truncated Hemoglobin HbN: Exploring the Molecular Basis of the NO Detoxification Mechanism*, A. Crespo, M.A. Martí, S.G. Kalko, A. Morreale, M. Orozco, J.L. Gelpi, F.J. Luque, **D.A. Estrin** *Journal of the American Chemical Society* (American Chemical Society) (2005), 127, 4433-4444.
- 52)** *Transnitrosation of Nitrosothiols: characterization of an elusive intermediate*, L.L. Perissinotti, A.G. Turjanski, **D.A. Estrin**, F. Doctorovich, *Journal of the American Chemical Society* (American Chemical Society) (2005), 127, 486-487.
- 51)** *Ab initio study of NMR 15N chemical shift differences induced by Ca²⁺ binding to EF-hand proteins* R Biekofsky, A.G. Turjanski, **D. A. Estrin**, J. Feeney, A. Pastore, *Biochemistry*, (American Chemical Society) (2004) 43, 6554-6564.
- 50)** *QM-MM Study of Nitrite Reduction of Pseudomonas Aeruginosa*, M. Martí, A. Crespo, S.E. Bari, F. A. Doctorovich, **D. A. Estrin**, *Journal of Physical Chemistry B*. (American Chemical Society) (2004), 108, 18073-18080.
- 49)** *NMR and molecular dynamics studies of the interaction of melatonin with calmodulin* A. G. Turjanski, **D.A. Estrin**, R. E. Rosenstein, J. E. Mc Cormick, S. R. Martin, A. Pastore, R. Biekofsky, V. Martorana, *Protein Science*, (The Protein Society) (2004), 13, 2925-2938.
- 48)** *Modulation of NO trans effect in heme proteins: implications for the activation of soluble guanylate cyclase*, M. Martí, D. Scherlis, F. Doctorovich, P. Ordejón, **D. A. Estrin**, *Journal of Biological Inorganic Chemistry* (Springer) (2003), 8, 595-600.

- 47) *A DFT-Based QM-MM Approach Designed for the Treatment of Large Molecular Systems: Application to Chorismate Mutase* A. Crespo, D. A. Scherlis, M. A. Martí, P. Ordejón, A. E. Roitberg, **D. A. Estrin**, Journal of Physical Chemistry B. (American Chemical Society) (2003) 107; 13728-13736.
- 46) *Fast nitroxyl trapping by ferric porphyrins* S. Bari, M. A. Marti, V. Amorebieta, **D. A. Estrin**, F. Doctorovich, Journal of the American Chemical Society (American Chemical Society) (2003) 125, 15272-15273.
- 45) *Electronic spectra of indolyl radicals: a time dependent DFT study* A. Crespo, A. Turjanski, **D. A. Estrin**, Chemical Physics Letters (Elsevier), (2002) 365, 15-21.
- 44) *Environment Effects on Chemical reactivity of Heme Proteins* D. A. Scherlis, M. A. Martí, P. Ordejón, **D. A. Estrin**, International Journal of Quantum Chemistry (Wiley) (2002) 90, 1505-1514.
- 43) *Thermal and solvent effects on the coordination structure of LiAlH₄ : a computational study* E. Ascitutto, A. Crespo, **D. A. Estrin**, Chemical Physics Letters (Elsevier) (2002), 353, 178-184.
- 42) *Solvent-induced symmetry breaking of nitrate ion in aqueous clusters: a quantum classical simulation study* M.C. Gonzalez Lebrero, D. E. Bikiel, M. D. Elola, A. E. Roitberg, **D. A. Estrin**, Journal of Chemical Physics (American Institute of Physics) , (2002), 117, 2718-2725.
- 41) *Physiological concentrations of melatonin inhibit the nitridergic pathway in the syrian hamster retina* D. A. Saénz, A. G. Turjanski, G. B. Sacca, M. Martí, F. Doctorovich, M. I. Keller-Sarmiento, **D. A. Estrin**, R. E. Rosenstein, Journal of Pineal Research (Blackwell-Munksgaard), (2002), 33, 31-37.
- 40) *Reaction pathways of 2,2,2-trifluoroethylamine and n-butylamine with [Ru(bpy)₂(NO)Cl]²⁺* F. di Salvo, A. Crespo, **D. A. Estrin**, F. Doctorovich, Tetrahedron (Elsevier), (2002), 58, 4237-4244.
- 39) *Molecular structure effects on the kinetics of hydroxyl radical addition to azo dyes* H. Destailats, A. G. Turjanski, **D. A. Estrin**, M. R. Hoffman, Journal of Physical Organic Chemistry (Wiley), (2002), 15, 287-292.
- 38) *Structure and Spin-State Energetics of an Iron Porphyrin Model: an Assessment of Theoretical Methods* D. A. Scherlis, **D. A. Estrin**, International Journal of Quantum Chemistry (Wiley), (2002), 87, 158-166.
- 37) *Hydrogen Bonding and Oxygen Affinity of Hemoglobin* D. A. Scherlis **D. A. Estrin**, Journal of the American Chemical Society (American Chemical Society) (2001), 123, 8436-8437.
- 36) *Theoretical Investigation on the Electronic Structure of Pentacyanoferrate(II) Complexes with NO⁺, NO, and NO⁻ Ligands. Redox Interconversion, Protonation and Cyanide-Releasing reactions* M.C. González Lebrero, D. A. Scherlis, G. L. Estiú, J. A. Olabe, **D. A. Estrin**, Inorganic Chemistry (American Chemical Society) (2001), 40, 4127-4133.
- 35) *Nitrosation of Melatonin by Nitric Oxide: a Computational Study* A. G. Turjanski, D. A. Saénz, F. Doctorovich, **D. A. Estrin**, R. E. Rosenstein, Journal of Pineal Research (Blackwell-Munksgaard), (2001), 31, 97-101.
- 34) *Structure, Solvation and Bonding in Pentacyano(L)ferrate(II) Ions (L=aliphatic amine): a Density Functional Study* M.C. González Lebrero, A. G. Turjanski, J. A. Olabe, **D. A. Estrin**, Journal of Molecular Modeling (Springer), (2001), 7, 201-206.

- 33)** *Computer Simulation Study of HNO₃ Dissociation in Aqueous Clusters* M. D. Elola, D. Laria, E. J. Marceca, **D. A. Estrin**, Chemical Physics Letters (Elsevier), (2000), 326, 509-514.
- 32)** *Scavenging of NO by Melatonin* A. G. Turjanski, F. Leonik, **D. A. Estrin**, R. E. Rosenstein, F. Doctorovich, Journal of the American Chemical Society (American Chemical Society) (2000) 122, 10468-10469.
- 31)** *Stabilization of aliphatic and aromatic diazonium ions by coordination: an experimental and theoretical study* F. Doctorovich, N. Escola, C. Trapani, **D. A. Estrin**, M.C. González Lebrero, A. G. Turjanski, Organometallics (American Chemical Society), (2000), 19, 3810-3817.
- 30)** *Concertedness and solvent effects in multiple proton transfer reactions: the formic acid dimer in solution* J. Kohanoff, S. Koval, **D. A. Estrin**, D. Laria and Y. Abashkin, Journal of Chemical Physics (American Institute of Physics), (2000), 112, 9498-9508.
- 29)** *Nitric Oxide Binding to Ferric Cytochrome P450: A Computational Study* D.A. Scherlis, C. B. Cymmering, **D. A. Estrin**, Inorganic Chemistry (American Chemical Society) (2000), 39, 2352-2359.
- 28)** *N-Nitrosomelatonin* Turjanski, Z. Chaia, F. Doctorovich, **D. A. Estrin**, R. E. Rosenstein, E. Piro, Acta Crystallografica C (International Union of Crystallography), (2000), 56, 682-683.
- 27)** *Solvation and Conformational Properties of Melatonin: a Computational Study* Turjanski, R. Rosenstein **D. A. Estrin**, Journal of Molecular Modeling (Springer), (1999), 5, 271-280.
- 26)** *Isomerization and melting of Model Water Clusters: (H₂O)₆ and (H₂O)₈* J. Rodriguez, D. Laria, E. J. Marceca **D. A. Estrin**, Journal of Chemical Physics (American Institute of Physics), (1999), 110, 9039-9047.
- 25)** *Hybrid Quantum-Classical Molecular Dynamics Simulation of the proton Transfer of HO⁻ with HBr in Aqueous Clusters* M. D. Elola, D. Laria, **D. A. Estrin**, Journal of Physical Chemistry A (American Chemical Society), (1999), 103, 5105-5112.
- 24)** *Reactions of Melatonin and Related Indoles with Free Radicals: A Computational Study* G. Turjanski, R. E. Rosenstein, **D. A. Estrin**, Journal of Medicinal Chemistry (American Chemical Society), (1998), 41, 3684-3689.
- 23)** *Solvent Effects in Transition Metal Complexes: Study of The Basicity of Pentaammine-ruthenium(II) pyrazine and Pentacyano-ruthenium(II) pyrazine using Density Functional Theory* O. Y. Hamra, L. D. Slep, J. A. Olabe, **D. A. Estrin**, Inorganic Chemistry (American Chemical Society), (1998) 37, 2033-2038.
- 22)** *Ab initio Path Integral Monte Carlo Simulation of Isolated Systems: Application to Small Lithium Clusters* R. O. Weht, J. Kohanoff, **D. A. Estrin**, C. Chakravarty, Journal of Chemical Physics (American Institute of Physics) (1998), 108, 8848-8858.
- 21)** *Hybrid Quantum and Molecular Mechanical Monte Carlo Simulations of the Interaction of Hydrogen Chloride with Solid Water Clusters* **D. A. Estrin**, J. Kohanoff, D. Laria, R. O. Weht, Chemical Physics Letters (Elsevier), (1997), 280, 280-286.
- 20)** *AM1 Study of the Ground and Excited States Potential Energy Surfaces of Symmetric Carbocyanines* J. Rodriguez, D. Scherlis, **D. A. Estrin**, P. F. Aramendia, R. M. Negri, Journal of Physical Chemistry A (American Chemical Society) (1997) 101, 6998-7006.

- 19) *Structure and Bonding in Pentacyano-L-ferrate(II) and Pentacyano-L-ruthenate(II) Complexes L=pyridine, pyrazine, and N-methylpyrazinium: A Density Functional Study* **D. A. Estrin**, O. Y. Hamra, L. Paglieri, L. D. Slep, J. A. Olabe, *Inorganic Chemistry* (American Chemical Society), (1996) 35, 6832-6837.
- 18) *On small clusters of water molecules using Density Functional Theory* **D. A. Estrin**, L. Paglieri, G. Corongiu, E. Clementi, *Journal of Physical Chemistry* (American Chemical Society) (1996) 100,8701-8711.
- 17) *Acid dissociation in aprotic solvents: cluster and bulk environments* D. Laria, R. Kapral, **D. A. Estrin**, G. Ciccotti, *Journal of Chemical Physics* (American Institute of Physics) (1996) 104, 6560-6568.
- 16) *A Theoretical and Experimental Study of Medium Effects in the Structure and Spectroscopy of the [Fe(CN)5NO]²⁻ Ion* **D. A. Estrin**, L. M. Baraldo, L. D. Slep, B. C. Barja, J. A. Olabe, L. Paglieri, G. Corongiu, *Inorganic Chemistry* (American Chemical Society), (1996), 35, 3897-3903.
- 15) *Revisiting the Potential Energy Surface for [H3N...HCl]: an Ab-initio and Density Functional Theory Investigation* G. Corongiu, **D. A. Estrin**, G. Murgia, L. Paglieri, L. Pisani, G. Suzzi Valli, J. Watts, E. Clementi, *International Journal of Quantum Chemistry* (Wiley), (1996), 59, 119-134.
- 14) *Solvent Effects in Density Functional Calculations of Uracil and Cytosine Tautomerism* L. Paglieri, G. Corongiu, **D. A. Estrin**, *International Journal of Quantum Chemistry* (Wiley), (1995) 56, 615-625.
- 13) *Density functional study of the tautomers of uracil and cytosine* **D. A. Estrin**, L. Paglieri, G. Corongiu, *Journal of Physical Chemistry* (American Chemical Society), (1994) 98, 5653-5660.
- 12) *Time scales and other problems in linking simulations of simple chemical systems to more complex ones* E. Clementi, G. Corongiu, **D. A. Estrin**, E. Hollauer, O. G. Stradella, *International Journal of Quantum Chemistry* (Wiley) (1993) 45, 511.
- 11) *Is AlAr₁₂ Icosahedral?* **D. A. Estrin**, L. Liu, S. J. Singer, *Journal of Physical Chemistry* (American Chemical Society) (1992) 96, 5325-5331.
- 10) *Electronic spectra of NaAr₄ and NaAr₆: Isomerization and Melting* C. Tsou, **D. A. Estrin**, S. J. Singer, *Journal of Chemical Physics* (American Institute of Physics) (1992) 96, 7977-7991.
- 9) *Accurate non-local electron-argon pseudopotential for condensed phase simulation* **D. A. Estrin**, C. Tsou, S. J. Singer, *Chemical Physics Letters* (Elsevier) (1991) 184, 571.
- 8) *Multiconfigurational Electronic Wave Function Without a Reference State: Analysis of a Simulated Annealing Strategy* **D. A. Estrin**, C. Tsou, S. J. Singer, *Journal of Chemical Physics* (American Institute of Physics) (1990) 93, 7201-7212.
- 7) *Electronic Energy Shifts of a Sodium Atom in Argon Clusters by Simulated Annealing* C. Tsou, **D. A. Estrin**, S. J. Singer, *Journal of Chemical Physics* (American Institute of Physics) (1990) 93, 7187-7200.
- 6) *Potential Energy Curves of Diatomic Molecules from the Hill Determinant Method* **D. A. Estrin**, F. M. Fernández, E. A. Castro, *Journal of Mathematical Chemistry* (Kluwer) (1990) 5, 177.
- 5) *On the Hill Determinant Method* **D. A. Estrin**, F. M. Fernández, E. A. Castro, *Journal of Physics A* (IOP Publishing Ltd) (1990) 23, 2395.
- 4) *Alternative Treatment of Rotational Quantum Systems* **D. A. Estrin**, F. M. Fernandez, E. A. Castro,

Zeitschrift für Physik D (Springer-Verlag) (1989) 14, 51.

3) *Generalized Hill Determinant Method*, **D. A. Estrin**, F. M. Fernández, E. A. Castro, *Physics Letters A* (Elsevier) (1988) 130, 330.

2) *Vibrational-Rotational Energy Levels of Diatomic Molecules from the Hill Determinant Method* **D. A. Estrin**, F. M. Fernández, E. A. Castro, *Journal of Molecular Structure Teochem* (Elsevier) (1988) 166, 257.

1) *Application of the Hill Determinant Method to the Vibrational Motion of Diatomic Molecules* **D. A. Estrin**, F. M. Fernández, E. A. Castro, *Journal of Chemical Physics* (American Institute of Physics) (1987) 87, 7059-7061.

Capítulos de libro:

6) *Exploring the Nitric Oxide Detoxification Mechanism of Mycobacterium tuberculosis Truncated Haemoglobin N*, A. Bidon Chanal, M.A. Marti, D.A. Estrin, F.J. Luque, in *Self Organization of Molecular Systems, from molecules to clusters to nanotubes and proteins*, Springer, Nato Science for Peace and Security Series- A: Chemistry and Biology, ISBN 978-90-481-2493-1, Editors: Nino Russo, V. Antonchenko, E. Kryachko, 2009, pp 33-47.

5) *The interaction between melatonin and calmodulin: a NMR and MD study*, A.G. Turjanski, D.A. Estrin, R.E. Rosenstein, J.E. MacCormick, S.R. Martin, A. Pastore, R.R. Biekofsky, V. Martorana, in *Melatonin: from molecules to therapy*. Editors: S.R. Randi-Perumal, Daniel Cardinali, Nova Publishers, ISBN 1-60021-121-6, 2007.

4) *Construyendo con átomos y moléculas*. Grupo Indigo. Editorial Eudeba, Buenos Aires, 2005.

3) *Structure and Dynamics of Molecular Systems with Density Functional Theory* **D. A. Estrin**, G. Corongiu and E. Clementi, in *METECC*, Chap.12, *Methods and Techniques in Computational Chemistry*, E. Clementi editor, STEF, Cagliari 1993.

2) *Solvent Effects in DFT Calculations. A Self-Consistent Reaction Field (SCRf) Approach* **D. A. Estrin**, in *METECC-95*, *Methods and Techniques in Computational Chemistry*, Chapter 7, STEF, Cagliari (1995).

1) *Computer simulation for chemical systems: from vacuum to solution* G. Corongiu, **D. A. Estrin**, L. Paglieri, In *Solvent effects and chemical reactivity*, O. Tapia Ed., Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, 1996.

Artículos de Divulgación:

2) *Como hacer experimentos sin ensuciarse las manos*, D.A. Scherlis and **D.A. Estrin**, Página 12, July 2005

1) *Los premiados de Química del 98: Las propiedades de las moléculas*, **D. A. Estrin** EXACTAMENTE (Revista de la FCEN - UBA (1998) 13, 27.