

Datos Personales

Nombre Elena Laura Coitiño Izaguirre
Nombre en citaciones bibliográficas Elena L. Coitiño; E. Laura Coitiño; E. L. Coitiño
Sexo Femenino
Nacimiento 11/09/1964, Montevideo, Uruguay

Información de contacto

E-m@il laurac@luna.fcien.edu.uy
URL lqtc.fcien.edu.uy
Teléfono 5252186
Dirección postal Laboratorio de Química Teórica y Computacional, Instituto de Química Biológica, Facultad de Ciencias, UdelaR. Iguá 4225 eq. Mataojó Uruguay

Áreas de actuación

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

Formación académica/Titulación

- 1991-1994** Doctorado - Dottorato di Ricerche in Scienze Chimiche
Universita degli Studi - Pisa, Italia
Título: Analisi dell'effetto del solvente su processi chimici coinvolgenti le trasformazioni di gruppi aldeidici. Estensioni del modello del continuo polarizzabile (PCM) Año de obtención: 1995
Tutor: Jacopo Tomasi
Becario de: Comunidad Económica Europea,
Palabras Clave: modelado de procesos reactivos en fase condensada; modelo continuo PCM de solvente; aldehídos y oxoaldehídos
Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales/Ciencias Químicas/Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica/Química Teórica y Computacional, Bioinformática Estructural.
- 1988-1991** Maestría - Maestría en Química (UDELAR-PEDECIBA)
Universidad de la República - Facultad de Química, Uruguay
Título: Estudio Teórico del Efecto del Agua sobre las Reacciones de Condensación Aldólica del Acetaldehído Año de obtención: 1991
Tutor: Oscar N. Ventura
Becario de: Programa de Desarrollo de las Ciencias Básicas, Uruguay
Palabras Clave: modelado de mecanismos; métodos cuánticos; catálisis bifuncional por agua
Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales/Ciencias Químicas/Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica/Química Cuántica, Físicoquímica Orgánica.
- 1983-1985** Grado - Bachiller en Química
Universidad de la República - Facultad de Química, Uruguay
Título: No corresponde Año de obtención: 1988
Tutor: No corresponde
Palabras Clave: Química fundamental
Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales/Ciencias Químicas/Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica/Química Fundamental.

Formación complementaria

- 1995-1997** Postdoctorado
University of Minnesota, Estados Unidos
Título: Minnesota Supercomputer Institute International Scholar - Institute of Technology - Dept. of Chemistry.
Palabras Clave: métodos híbridos IMOMO; Teoría Variacional del Estado de Transición; modelado cinética procesos cont. atmosférica
Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales/Ciencias Químicas/Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica/Química Fundamental.
- 2003-2003** Cursos de corta duración
Universidad de la República - Facultad de Ingeniería, Uruguay
Título: Motivación en el aula universitaria.
Áreas del conocimiento: Ciencias Sociales/Ciencias de la Educación/Educación General/Modelos pedagógicos, motivación en el aprendizaje.
- 2003-2003** Cursos de corta duración
Universidad de la República. Comisión Sectorial de Enseñanza. , Uruguay
Título: Curso de Diseño de Materiales Educativos para entornos virtuales.
Áreas del conocimiento: Ciencias Sociales/Ciencias de la Educación/Educación General/Educación a distancia, materiales.
- 2001-2001** Cursos de corta duración
Universidad de la República. Comisión Sectorial de Enseñanza. , Uruguay
Título: Metodología Pedagógica y Campus Digital para la Educación Semipresencial y a Distancia.
Áreas del conocimiento: Ciencias Sociales/Ciencias de la Educación/Educación General/Educación Semipresencial y a distancia.
- 2001-2001** Cursos de corta duración
Universidad de la República. Comisión Sectorial de Enseñanza. , Uruguay
Título: Educación a Distancia; Metodología Pedagógica, Medios Técnicos y Tutorías.
Áreas del conocimiento: Ciencias Sociales/Ciencias de la Educación/Educación General/Educación a distancia, tutorías.
- 2001-2001** Cursos de corta duración
Universidad de la República. Comisión Sectorial de Enseñanza. , Uruguay
Título: Comunicación en el Aula Universitaria.
Áreas del conocimiento: Ciencias Sociales/Ciencias de la Educación/Educación General/comunicación en la enseñanza y aprendizaje.
- 1997-1997** Cursos de corta duración
Universidad de la República - Facultad de Ingeniería, Uruguay
Título: Desarrollo de Material multimedia Interactivo de Apoyo a la Docencia.
Áreas del conocimiento: Ciencias Sociales/Ciencias de la Educación/Educación General/Informática Educativa.

- 1996-1996** Cursos de corta duración
University of Minnesota, Estados Unidos
Título: Cray T3D Tutorial: Introduction to MPI - Minnesota Supercomputer Institute.
Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales/Ciencias de la Computación e Información/Ciencias de la Computación/Cálculo Paralelo de alta performance .
- 1993-1993** Cursos de corta duración
Universita degli Studi - Pisa, Italia
Título: Teoría de los Funcionales de la Densidad.
Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales/Ciencias Químicas/Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica/Química Teórica.
- 1990-1990** Cursos de corta duración
Universidad Autonoma de Barcelona, España
Título: Introducción al Sistema Operativo VMS 5.2.
Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales/Ciencias de la Computación e Información/Ciencias de la Computación/Sistemas operativos.
- 1989-1989** Cursos de corta duración
Universidad de la República - Facultad de Química, Uruguay
Título: Métodos Teóricos en Química Organometálica.
Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales/Ciencias Químicas/Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica/Modelado Quím. Organometálica.
- 1987-1987** Cursos de corta duración
Instituto de Investigaciones Físicoquímicas Teóricas y Aplicadas, Argentina
Título: Escuela de Verano de Química Teórica - Fotoquímica.
Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales/Ciencias Químicas/Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica/Fotoquímica.
- 1987-1987** Cursos de corta duración
Instituto de Investigaciones Físicoquímicas Teóricas y Aplicadas, Argentina
Título: Curso Avanzado de Química Teórica.
Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales/Ciencias Químicas/Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica/Cálculos Moleculares en Química Teórica.
- 2005** Otros
Ciencia, Tecnología y Sociedad: aportes desde el enfoque de género (curso virtual 120 hs), INEAM-OEA, Cátedra UNESCO Mujer Ciencia y Tecnología-FLACSO. Estados Unidos
Áreas del conocimiento: Ciencias Sociales/Ciencias de la Educación/Educación General/Enfoque CTS y género.
- 2002** Seminarios
Evaluación de Aprendizajes (16 hs), Universidad de la República, Comisión Sectorial de Enseñanza - Area C&T. Uruguay
Áreas del conocimiento: Ciencias Sociales/Ciencias de la Educación/Educación General/Evaluación del aprendizaje.
- 1997** Seminarios
Nuevas Técnicas de Enseñanza e Innovación Pedagógica, Cátedra UNESCO - AUGM - UDELAR. Uruguay
- 1993** Seminarios
Seminario Nazionale di Chimica Fisica 1993 - Metodos Químico Físicos para el estudio de la catálisis, IFS-Europa. Italia
Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales/Ciencias Químicas/Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica/Catálisis - teoría y experimento.
- 1988** Seminarios
VI Escuela LATinoamericana de Química Teórica, Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas (CBPF), Río de Janeiro. Brasil
Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales/Ciencias Químicas/Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica.
- 1988** Otros
Pasantía (5 semanas) de entrenamiento en Espectroscopía FT-IR, FTIR Spectroscopy Lab., Division of Chemistry, NRC, Ottawa. Canadá
Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales/Ciencias Químicas/Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica/Espectroscopía FT-IR.
- 1987** Otros
Pasantía (6 semanas) de entrenamiento en Espectroscopía RMN, Laboratorio de RMN, FCEN, Universidad de Buenos Aires. Argentina
Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales/Ciencias Químicas/Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica/Espectroscopía RMN .

Idiomas

- Entiende** Inglés(Muy bien) Italiano(Muy bien) Francés(Regular) Portugués(Bien) Español(Muy bien)
Habla Inglés(Muy bien) Italiano(Muy bien) Francés(Regular) Portugués(Regular) Español(Muy bien)
Lee Inglés(Muy bien) Italiano(Muy bien) Francés(Bien) Portugués(Bien) Español(Muy bien)
Escribe Inglés(Muy bien) Italiano(Muy bien) Francés(Regular) Portugués(Regular) Español(Muy bien)

Actuación profesional

Universidad de la República - Facultad de Ciencias - UDELAR

Vínculos con la institución

- 1997 - Actual **Vínculo: Funcionario/Empleado. Encuadramiento funcional: Profesor de Química Teórica y Computacional. Carga horaria: 40. Régimen: Dedicación total**
- 1997 - 1997 **Vínculo: Funcionario/Empleado. Encuadramiento funcional: Prof. Adj. Química Teórica y Computacional. Carga horaria: 40.**
- 1993 - 1997 **Vínculo: Funcionario/Empleado. Carga horaria: 30.**
- Otras informaciones** Apartamiento de carrera en el cargo efectivo entre abril y octubre 1997 por asumir un contrato de Prof. Adjunto de Química Teórica y Computacional para hacerme cargo de instalar el Laboratorio de Química Teórica y Computacional y conducirlo. Renuncia antes del vencimiento al asumir por concurso el cargo de Profesora Agregada de la misma unidad.
- 1995 - 1996 **Vínculo: Funcionario/Empleado. Encuadramiento funcional: Asistente de Química Teórica y Computacional. Carga horaria: 40.**

Otras informaciones Beca de retorno CSIC-UDELAR al culminar el Ph.D. en Italia, correspondiente a la diferencia de sueldo entre Gr.2, 30 hs y Gr.3, 40 hs.

1991 - 1993 **Vínculo: Funcionario/Empleado. Encuadramiento funcional: Asistente de Química Teórica y Computacional. Carga horaria: 30.**

Otras informaciones Ingreso por concurso de méritos, prorrogada por un período reglamentario de un año hasta concursar por méritos y pruebas por la efectividad en el cargo.

1990 - 1991 **Vínculo: Funcionario/Empleado. Encuadramiento funcional: Asistente Académico del Decano. Carga horaria: 30.**

Otras informaciones Asistente Académico del Decano de Facultad de Ciencias, Dr. Mario Wschebor

Actividades

03/2008 - 03/2010 *Gestión Académica*, Asamblea del Claustro, Comisión de Enseñanza (Coordinación)
Cargos o funciones

1. Delegada docente titular, Coordinadora de la Comisión.

03/2007 - 03/2009 *Gestión Académica*, Instituto de Química Biológica, Comisión Directiva
Cargos o funciones

1. Delegada docente titular.

03/2006 - 03/2008 *Gestión Académica*, Asamblea del Claustro, Presidencia del órgano
Cargos o funciones

1. Presidente de la Mesa del Claustro, delegada docente titular.

04/1998 - 06/2008 *Docencia/Enseñanza*, Licenciatura en Bioquímica,
Nivel: Especialización
Disciplinas dictadas

1. Curso Taller de Química Computacional - Módulo I (modelado de procesos químicos reactivos).

03/1998 - 11/2008 *Docencia/Enseñanza*, Licenciatura en Bioquímica,
Nivel: Grado
Disciplinas dictadas

1. Físicoquímica Moderna - Estructura y Propiedades Moleculares (BQF03).

03/2006 - 06/2007 *Docencia/Enseñanza*, Licenciatura en Bioquímica,
Nivel: Grado
Disciplinas dictadas

1. Química General.

05/2003 - 05/2004 *Gestión Académica*, Comisiones Interfacultades, Ciencias-Química // Ciencias-Ingeniería
Cargos o funciones

1. Delegada docente en las Comisiones para redefinir los perfiles de egreso de la Lic. en Bioquímica.

02/2003 - 05/2003 *Docencia/Enseñanza*,
Nivel: Maestría
Disciplinas dictadas

1. Comjugando métodos teóricos y experimentales para el estudio de la cinética de procesos químicos.

03/2001 - 04/2003 *Gestión Académica*, Instituto de Química Biológica, Dirección
Cargos o funciones

1. Directora de Instituto.

03/2000 - 03/2003 *Gestión Académica*, Facultad de Ciencias-Facultad de Química, Comisión Académica Interfacultades -
Bioquímica-Bioquímico Clínico
Cargos o funciones

1. Delegada docente titular, gestión de la articulación entre carreras.

08/1999 - 09/2003 *Docencia/Enseñanza*, Licenciatura en Bioquímica,
Nivel: Grado
Disciplinas dictadas

1. Química Analítica.

08/1999 - 12/2003 *Docencia/Enseñanza*,
Nivel: Grado
Disciplinas dictadas

1. Química de la Atmósfera y Polución.

03/2000 - 03/2002 *Gestión Académica*, Asamblea del Claustro, Comisión de Planes de Estudio
Cargos o funciones

1. Delegada docente titular, integrante de la Comisión.

03/1997 - 06/2002 *Docencia/Enseñanza*, Licenciatura en Bioquímica,
Nivel: Grado
Disciplinas dictadas

1. Modelos Teórico-Computacionales en Físicoquímica.

11/1999 - 03/2001 *Gestión Académica*, Instituto de Química Biológica, Comisión Directiva
Cargos o funciones

1. Delegada docente suplente.

11/1998 - 03/2001 *Gestión Académica*, Consejo de Facultad, Comisión de informática
Cargos o funciones

1. Delegada docente titular.

03/1998 - 03/2000 *Gestión Académica*, Asamblea del Claustro, Comisión Posgrados, inserción laboral y relacionamiento con el medio
Cargos o funciones

1. Delegada docente titular.

06/1998 - 09/1999 *Gestión Académica*, Comisión Asesora del área Bioquímica (CABQ), Ejecución presupuestal
Cargos o funciones

1. Delegada docente titular, gestión y seguimiento de la ejecución presupuestal.

06/1997 - 12/1999 *Gestión Académica*, Comisión Coordinadora Docente, Licenciatura en Bioquímica
Cargos o funciones

1. Delegada docente .

08/1997 - 06/1998 *Docencia/Enseñanza*, Nivel: Especialización
Disciplinas dictadas
1. Termodinámica Estadística y aplicaciones a la Cinética Química.

05/1995 - 06/1995 *Docencia/Enseñanza*, Licenciatura en Ciencias Biológicas, Nivel: Grado
Disciplinas dictadas
1. Química General.

08/1995 - 09/1995 *Gestión Académica*, Instituto de Química, Comisión Directiva
Cargos o funciones
1. Delegada docente suplente (se indica sólo el período de actividad) .

Universidad de la República - Facultad de Química - UDELAR

Vínculos con la institución

1995 - 1995 **Vínculo: Funcionario/Empleado. Encuadramiento funcional: Profesor Adjunto de Química Cuántica. Carga horaria: 20.**

Otras informaciones Designada por concurso de méritos. Contrato por proyecto CONICYT-BID 009 + compensada.

1987 - 1990 **Vínculo: Colaborador. Encuadramiento funcional: Ayudante Honorario de Química Cuántica. Carga horaria: 6.**

Otras informaciones Ayudante Honorario, designada por 3 períodos consecutivos de un año por el Consejo de la Facultad. Carga horaria mínima a cumplir 6 hs/sem. Carga real desarrollada del orden de 20 hs/sem.

1989 - 1989 **Vínculo: Funcionario/Empleado. Encuadramiento funcional: Ayudante de Química Cuántica. Carga horaria: 20.**

Otras informaciones Designada por concurso de méritos, cargo de 3 meses financiado por economías

1986 - 1987 **Vínculo: Colaborador. Encuadramiento funcional: Aspirante a Ayud. Honorario de Quím. Cuántica. Carga horaria: 6.**

Otras informaciones Designada por el Consejo por concurso de pruebas por un período de un año, paso previo a ingresar como Ayudante Honorario. La carga horaria semanal fue del orden de 20 hs/sem.

Actividades

05/1995 - 09/1995 *Docencia/Enseñanza*, Maestría en Química (UDELAR-PEDECIBA), Nivel: Especialización
Disciplinas dictadas
1. Química Cuántica - Curso introductorio.

08/1991 - 09/1991 *Docencia/Enseñanza*, Nivel: Especialización
Disciplinas dictadas
1. Mecánica Cuántica.

06/1988 - 06/1991 *Líneas de Investigación*, Cátedra de Química Cuántica
Líneas de investigación
1. [Caracterización Físicoquímica de Plásticos Polivinílicos Derivados de Aldehídos de Interés Químico y Bioquímico.](#)

Líneas de investigación

1 Caracterización Físicoquímica de Plásticos Polivinílicos Derivados de Aldehídos de Interés Químico y Bioquímico

Integrante del Equipo
Objetivos: Modelado de procesos de hidratación de aldehídos simples con métodos cuánticos semiempíricos (en Montevideo) y ab initio (en Barcelona)
Palabras Clave: modelado de reacciones de aldehídos
Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales/Ciencias Químicas/Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica/Química Teórica y Computacional.
Electroquímica/Química Cuántica, Físicoquímica Orgánica.

Producción científica/tecnológica

Producción bibliográfica

Artículos completos publicados en revistas arbitradas

- PABLO D. DANS; ALEJANDRO CRESPO; DARÍO A. ESTRÍN; Elena L. Coitiño; E. Laura Coitiño; E. L. Coitiño** Structural and Energetic Study of Cisplatin and Derivatives: Comparison of the Performance of Density Functional Theory Implementations. *Journal of Chemical Theory and Computation*, v. 4 5 , p. 740-750, 2008.
Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales/Ciencias Químicas/Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica/Química Teórica y Computacional.
Medio de divulgación: Papel; ISSN/ISBN: 1549-9618
- YAO-YUAN CHUANG; Elena L. Coitiño; E. Laura Coitiño; E. L. Coitiño; DONALD G. TRUHLAR** How should we calculate Transition State Geometries for Radical Reactions? The Effect of Spin Contamination on the Prediction of Geometries for Open-Shell Saddle Points.. *Journal of Physical Chemistry A*, v. 104 3 , p. 446-450, 2000.
Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales/Ciencias Químicas/Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica/Química Teórica y Computacional.
Medio de divulgación: Papel; ISSN/ISBN: 1089-5639
- JOSÉ C. CORCHADO; Elena L. Coitiño; E. Laura Coitiño; E. L. Coitiño; YAO-YUAN CHUANG; PATTON L. FAST; DONALD G. TRUHLAR** Interpolated Variational Transition-State Theory by Mapping. *Journal of Physical Chemistry A*, v. 102 , p. 2424-2438, 1998.
Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales/Ciencias Químicas/Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica/Química Teórica y Computacional.
Medio de divulgación: Papel; ISSN/ISBN: 1089-5639
- ORLANDO ROBERTO-NETO; Elena L. Coitiño; E. Laura Coitiño; E. L. Coitiño; DONALD G. TRUHLAR** Dual-Level Direct Dynamics Calculations of Deuterium and Carbon-13 Kinetic Isotopic Effects for the Reaction Cl + CH4. *Journal of Physical Chemistry A*, v. 102 24 , p. 4568-4578, 1998.
Palabras Clave: Atmospheric Chemistry; Kinetic Isotopic effects
Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales/Ciencias Químicas/Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica/Química Teórica y Computacional.
Medio de divulgación: Papel; ISSN/ISBN: 1089-5639

- 5 **Elena L. Coitiño; E. Laura Coitiño; E. L. Coitiño; ENIO CIUFFARIN; FRANCA M. FLORIS; JACOPO TOMASI** Degenerate Lithium-Hydrogen Exchange Reactions: An Alternative Mechanism for Metalation of CH₄ in Gas Phase and Tetrahydrofuran Solution. *Journal of Physical Chemistry A*, v. 102 43 , p. 8369-8376, 1998.
Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales/Ciencias Químicas/Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica/Química Teórica y Computacional.
Medio de divulgación: Papel; ISSN/ISBN: 1089-5639
- 6 **JOAQUÍN ESPINOSA-GARCÍA; Elena L. Coitiño; E. Laura Coitiño; E. L. Coitiño; ANGELS GONZÁLEZ-LAFONT; JOSE M. LLUCH** Reaction Path and Dual-Level Dynamics Calculations of the CH₃F + OH Reaction. *Journal of Physical Chemistry A*, v. 102 52 , p. 10715-10722, 1998.
Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales/Ciencias Químicas/Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica/Química Teórica y Computacional.
Medio de divulgación: Papel; ISSN/ISBN: 1089-5639
- 7 **Elena L. Coitiño; E. Laura Coitiño; E. L. Coitiño; MOLLI NOLAND; DONALD G. TRUHLAR** Correlated Capped Subsystem Method for the Calculation of Substituent Effects on Bond Energies.. *Journal of Physical Chemistry A*, v. 101 7 , p. 1193-1197, 1997.
Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales/Ciencias Químicas/Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica/Química Teórica y Computacional.
Medio de divulgación: Papel; ISSN/ISBN: 1089-5639
- 8 **Elena L. Coitiño; E. Laura Coitiño; E. L. Coitiño; DONALD G. TRUHLAR** Systematic Analysis of Bond Energies Calculated by the Integrated Molecular Orbital-Molecular Orbital (IMOMO) Method.. *Journal of Physical Chemistry A*, v. 101 , p. 4641-4645, 1997.
Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales/Ciencias Químicas/Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica/Química Teórica y Computacional.
Medio de divulgación: Papel; ISSN/ISBN: 1089-5639
- 9 **Elena L. Coitiño; E. Laura Coitiño; E. L. Coitiño; JACOPO TOMASI** Solvent Effects on the Internal Rotation of Neutral and Protonated Glyoxal.. *Chemical Physics*, v. 204 , p. 391-402, 1996.
Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales/Ciencias Químicas/Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica/Química Teórica y Computacional.
Medio de divulgación: Papel; ISSN/ISBN: 0301-0104
- 10 **OSCAR N. VENTURA; MARTINA KIENINGER; Elena L. Coitiño; E. Laura Coitiño; E. L. Coitiño** Density functional study of the isomerization of fluoro-and chloroformaldehyde radical cations.. *Journal of Computational Chemistry*, v. 17 11 , p. 1309-1317, 1996.
Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales/Ciencias Químicas/Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica/Química Teórica y Computacional.
Medio de divulgación: Papel; ISSN/ISBN: 0192-8651
- 11 **Elena L. Coitiño; E. Laura Coitiño; E. L. Coitiño; DONALD G. TRUHLAR; KEIJI MOROKUMA** Correlated Capped Subsystem Calculations as a Way to Include Electron Correlation Locally: A Test for Substituent Effects on Bond Energies.. *Chemical Physics Letters*, v. 259 , p. 159-164, 1996.
Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales/Ciencias Químicas/Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica/Química Teórica y Computacional.
Medio de divulgación: Papel; ISSN/ISBN: 0009-2614
- 12 **Elena L. Coitiño; E. Laura Coitiño; E. L. Coitiño; JACOPO TOMASI; ROBERTO CAMMI** On the Evaluation of the solvent Polarization Apparent Charges in the Polarizable Continuum Model: A new formulation.. *Journal of Computational Chemistry*, v. 16 1 , p. 20-30, 1995.
Palabras Clave: Polarizable Continuum Model; Model extension; solvent polarization apparent charges
Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales/Ciencias Químicas/Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica/Química Teórica y Computacional.
Medio de divulgación: Papel; ISSN/ISBN: 0192-8651
- 13 **Elena L. Coitiño; E. Laura Coitiño; E. L. Coitiño; ALBERTO PEREIRA; OSCAR N. VENTURA** High-level Ab Initio Prediction of the Structure and IR Spectra of Formaldehyde-Water Radical-Cation Complexes. *Journal of Chemical Physics*, v. 102 7 , p. 2833-2840, 1995.
Palabras Clave: Structure and IR spectra; radical cation complexes
Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales/Ciencias Químicas/Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica/Química Teórica y Computacional.
Medio de divulgación: Papel; ISSN/ISBN: 0021-9606
- 14 **ALBERTO PEREIRA; Elena L. Coitiño; E. Laura Coitiño; E. L. Coitiño; OSCAR N. VENTURA** Ab initio Study of the Structure of Radical Cations Derived from H-bonded Complexes: A Comparison between [H₂CO.H₂O]⁺ and [H₂CO.HF]⁺.. *Journal of Molecular Structure Theochem*, v. 314 , p. 31-38, 1994.
Palabras Clave: cation radical complexes; ab initio HF and MP2 modeling; effects of changing H acceptor
Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales/Ciencias Químicas/Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica/Química Teórica y Computacional.
Medio de divulgación: Papel; ISSN/ISBN: 0166-1280
- 15 **Elena L. Coitiño; E. Laura Coitiño; E. L. Coitiño; JACOPO TOMASI; OSCAR N. VENTURA** Importance of Water in Aldol Condensation Reactions of Acetaldehyde.. *Journal of the Chemical Society, Faraday Transactions*, v. 90 12 , p. 1745-1755, 1994.
Palabras Clave: acetaldehyde aldol condensation; water as catalyst and solvent; PCM localized orbital analysis
Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales/Ciencias Químicas/Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica/Química Teórica y Computacional.
Medio de divulgación: Papel; ISSN/ISBN: 0956-5000
- 16 **Elena L. Coitiño; E. Laura Coitiño; E. L. Coitiño; OSCAR N. VENTURA** Isomerization of the Formaldehyde radical cation and the failure of MP2. *Chemical Physics Letters*, v. 202 6 , p. 479-482, 1993.
Palabras Clave: formaldehyde radical cation; isomerization; MP2 failure
Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales/Ciencias Químicas/Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica/Química Teórica y Computacional.
Medio de divulgación: Papel; ISSN/ISBN: 0009-2614
- 17 **Elena L. Coitiño; E. Laura Coitiño; E. L. Coitiño; AGUSTÍ LLEDÓS; RAMÓN SERRA; JUAN BERTRÁN; OSCAR N. VENTURA** Ab Initio Study of Structure and Reactivity of H₂CO.H₂O⁺ and related radical cations. *Journal of the American Chemical Society*, v. 115 20 , p. 9121-9126, 1993.
Palabras Clave: radical cation complexes; structure and reactivity; ab initio HF and MP2 modeling
Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales/Ciencias Químicas/Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica/Química Teórica y Computacional.
Medio de divulgación: Papel; ISSN/ISBN: 0002-7863
- 18 **Elena L. Coitiño; E. Laura Coitiño; E. L. Coitiño; OSCAR N. VENTURA; RAMÓN M. SOSA** Comparative Ab Initio and Semiempirical Study of Hydrogen-Bonded Complexes of Water and Ammonia.. *Journal of Molecular Structure Theochem*, v. 254 , p. 315-328, 1992.
Palabras Clave: Performance métodos cuánticos; complejos de NH₃ y H₂O
Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales/Ciencias Químicas/Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica/Química Teórica y Computacional.
Medio de divulgación: Papel; ISSN/ISBN: 0166-1280

19 OSCAR N. VENTURA; *Elena L. Coitiño*; *E. Laura Coitiño*; *E. L. Coitiño*; AGUSTÍ LLEDÓS; JUAN BERTRÁN Analysis of the Gas-Phase Addition of Water to Formaldehyde. A Semiempirical and Ab Initio Study of Simultaneous General Acid and Base Catalysis by H₂O.. Journal of Computational Chemistry, v. 13 9 , p. 1037-1046, 1992.

Palabras Clave: Performance de métodos cuánticos; catálisis bifuncional por agua; Hidratación de aldehídos

Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales/Ciencias Químicas/Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica/Química Teórica y Computacional.

Medio de divulgación: Papel; ISSN/ISBN: 0192-8651

20 *Elena L. Coitiño*; *E. Laura Coitiño*; *E. L. Coitiño*; OSCAR N. VENTURA Theoretical Studies of Hydrogen-Bonded Complexes Using Semiempirical Methods. Journal of Molecular Structure Theochem, v. 210 , p. 405-426, 1990.

Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales/Ciencias Químicas/Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica/Química Teórica y Computacional.

Medio de divulgación: Papel; ISSN/ISBN: 0166-1280

21 *Elena L. Coitiño*; *E. Laura Coitiño*; *E. L. Coitiño*; KENNETH IRVING; JOSÉ RAMA; OSCAR N. VENTURA Comparison of Semiempirical and BSSE Corrected Möller-Plesset Ab Initio Calculations on the Direct Addition of Water to Formaldehyde.. Journal of Molecular Structure Theochem, v. 210 , p. 427-440, 1990.

Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales/Ciencias Químicas/Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica/Química Teórica y Computacional.

Medio de divulgación: Papel; ISSN/ISBN: 0166-1280

22 OSCAR N. VENTURA; *Elena L. Coitiño*; *E. Laura Coitiño*; *E. L. Coitiño*; AGUSTÍ LLEDÓS; JUAN BERTRÁN AM1 Study of -hydrogen-Bonded Complexes of Water. Journal of Molecular Structure Theochem, v. 177 , p. 55-68, 1989.

Palabras Clave: Performance AM1 en complejos de enlace hidrógeno

Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales/Ciencias Químicas/Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica/Química Teórica y Computacional.

Medio de divulgación: Papel; ISSN/ISBN: 0166-1280

23 *Elena L. Coitiño*; *E. Laura Coitiño*; *E. L. Coitiño*; OSCAR N. VENTURA Aplicación de métodos semiempíricos derivados del MNDO a la determinación de la estructura y la reactividad de complejos de enlace de hidrógeno.. Folia Chimica Theoretica Latina, v. XVII , p. 191-223, 1989.

Palabras Clave: Métodos semiempíricos; Sistemas con enlace ed hidrógeno; modelado estructura y reactividad

Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales/Ciencias Químicas/Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica/Química Teórica y Computacional.

Medio de divulgación: Papel; ISSN/ISBN: 0378-4843

Artículos completos publicados en revistas NO arbitradas

1 ROZEEANNE STECKLER; YAO-YUAN CHUANG; PATTON L. FAST; *Elena L. Coitiño*; *E. Laura Coitiño*; *E. L. Coitiño*; JOSÉ C. CORCHADO; DONALD G. TRUHLAR POLYRATE: A Computer Program for the Calculation of Chemical Reaction Rates for Polyatomics (version 7.3.1). Quantum Chemistry Exchange Program bulletin, v. 17 , p. 34-36, 1997.

Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales/Ciencias Químicas/Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica/Química Teórica y Computacional.

Medio de divulgación: Papel; ISSN/ISBN: 0889-7514

Resúmenes expandidos en anales de eventos

1 DONALD G. TRUHLAR; YAO-YUAN CHUANG; *Elena L. Coitiño*; *E. Laura Coitiño*; *E. L. Coitiño*; PATTON L. FAST; JOSÉ C. CORCHADO; CHRISTOPHER J. CRAMER Thermochemistry, Solvation, and Dynamics.. In: ACS National Symposium - Fall 1999 - Symposium CHEMISTRY OF REACTIVE INTERMEDIATES AND MODELING IN HYDROCARBON CONVERSION, 1999 New Orleans American Chemical Society Division of Fuel Chemistry Preprints of Symposia. 2000.

Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales/Ciencias Químicas/Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica/Química Teórica y Computacional.

; Medio de divulgación: Papel

Producción técnica

Productos tecnológicos sin registro o patente

1 YAO-YUAN CHUANG; MOLLI NOLAND; *Elena L. Coitiño*; *E. Laura Coitiño*; *E. L. Coitiño*; DONALD G. TRUHLAR DDUutilities. 1999.

Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales/Ciencias Químicas/Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica/Química Teórica y Computacional.

Referencias adicionales: Uruguay; Medio de divulgación: Internet;

Inst. promotora/financiadora: University of Minnesota

2 JOSÉ C. CORCHADO; *Elena L. Coitiño*; *E. Laura Coitiño*; *E. L. Coitiño*; YAO-YUAN CHUANG; DONALD G. TRUHLAR GAUSSRATE versions 7.2-7.3. 1997.

Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales/Ciencias Químicas/Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica/Química Teórica y Computacional.

Referencias adicionales: Estados Unidos; Medio de divulgación: Internet;

Finalidad: (An interface for running Direct Dynamics Calculations Using Modular versions of POLYRATE and GAUSSIAN94 Codes; Disponibilidad: Restricta;

Inst. promotora/financiadora: University of Minnesota

3 DONALD G. TRUHLAR; *Elena L. Coitiño*; *E. Laura Coitiño*; *E. L. Coitiño* POLYRATE versions 7.0-9.1 (A Program for Calculating Variational Transition State Theory Chemical Rates with Semiclassical Tunneling).. 1996.

Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales/Ciencias Químicas/Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica/Química Teórica y Computacional.

Referencias adicionales: Estados Unidos; Medio de divulgación: Internet;

Finalidad: Mejoras al programa de cálculo principal para el uso de la teoría variacional del estado de transición; Disponibilidad: Restricta;

Inst. promotora/financiadora: University of Minnesota

El número de autores es extenso. Mis aportes arrancan en el año 1996, durante la estancia postdoctoral en el grupo del Prof. D.G. Truhlar en la Universidad de Minnesota.

4 *Elena L. Coitiño*; *E. Laura Coitiño*; *E. L. Coitiño*; ROSSANA BONACCORSI; ROBERTO CAMMI Programa MGPIA94 . 1994.

Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales/Ciencias Químicas/Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica/Química Teórica y Computacional.

Referencias adicionales: Italia; Medio de divulgación: Disquetes;

Finalidad: Incorporación de nuevas extensiones del modelo PCM del Solvente al programa MONSTERGAUSS87 ; Disponibilidad: Restricta;

Inst. promotora/financiadora: CEE y Universidad de Pisa

Otro tipo de Producción y Gestión(técnica)

- Elena L. Coitiño; E. Laura Coitiño; E. L. Coitiño** Data Mining en Bioinformática. 2007. (Cursos de corta duración dictados/Especialización)
Referencias adicionales: Uruguay/Español;
Inst. promotora/financiadora: Facultad de Ciencias
Participación: Organizador. Duración: 2 semanas. Unidad: Facultad de Ciencias Lugar: Facultad de Ciencias. Ciudad: Montevideo.
- Elena L. Coitiño; E. Laura Coitiño; E. L. Coitiño** Química de la Atmósfera y Polución . 2003. (Desarrollo de material didáctico o de instrucción)
Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales/Ciencias de la Tierra y relacionadas con el Medio Ambiente/Meteorología y Ciencias Atmosféricas/Química de la atmósfera limpia y contaminada.
Referencias adicionales: Uruguay/Español; Medio de divulgación: CD-Rom

Finalidad: Libro de texto en producción. Caps 1-4, 210 pp.
El libro fue desarrollado inicialmente para su uso en soporte CD y acceso a través de Internet para el curso homónimo de posgrado, recibiendo apoyo parcial de la Comisión Sectorial de Educación Permanente (2001). Entre 2002-2003 se trabajó en su elaboración en formato impreso, disponiéndose en forma final de los primeros 4 capítulos (210 pp.), y restando culminar los 2 últimos. Este trabajo quedó trunco en 2004 a raíz de atravesar serios problemas de salud, pero se pretende concluir en algún momento.
- Elena L. Coitiño; E. Laura Coitiño; E. L. Coitiño** XXXVIII Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina. 2002. (Organización de eventos/Congreso)
Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales/Ciencias Químicas/Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica/Química Teórica y Computacional.
Referencias adicionales: Uruguay/Español; Medio de divulgación: Internet;
Inst. promotora/financiadora: Asociación Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina
Evento itinerante: Si. Catálogo disponible: No. Duración: 1 semanas. Lugar: Radisson Victoria Plaza. Ciudad: Montevideo.
- Elena L. Coitiño; E. Laura Coitiño; E. L. Coitiño** Bioinformática Estructural: Visualización y diseño asistido por PC de la estructura 3D de moléculas y macromoléculas. 2002. (Cursos de corta duración dictados/Especialización)
Referencias adicionales: Uruguay/Español
Participación: Organizador. Duración: 2 semanas. Unidad: Laboratorio de Química Teórica y Computacional

Otra producción

Tutorías concluidas

Tesis de maestría

- Pablo Dans** Modelado de las características estructurales y mecanismo de acción molecular de compuestos de Pd(II) y Pt(II) con potencial acción antineoplásica. 2003. **Disertación (Maestría en Química (UDELAR-PEDECIBA)), UDELAR - Universidad de la República - Facultad de Química. (Tutor)**
Palabras Clave: Compuestos cuadrado planos de Pt(II)/Pd(II)
Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales/Ciencias Químicas/Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica/diseño y optimización de fármacos in silico.
Referencias adicionales: Uruguay/Español, Tipo de orientación: Tutor principal
Culminados todos los cursos, actividades curriculares y trabajo de tesis planificado, el estudiante hizo su presentación oral previa a la defensa (tribunal Ventura, Coitiño, Cerecetto, Calificación 12/12) en octubre 2003. En lugar de presentar el documento de tesis, solicitó pasaje al nuevo régimen de posgrado, validando los 5 semestres de estudios realizados como la primera parte de sus estudios. Su propuesta fue aceptada en diciembre 2004 y la admisión al nivel Doctoral tuvo lugar en agosto 2005 (triunfal Kremer, Manta, Ventura).
- Leonidas Carrasco** Modelado de los procesos de combustión del metanol como combustible limpio para el ambiente. 1999. **Disertación (Maestría en Química (UDELAR-PEDECIBA)), UDELAR - Universidad de la República - Facultad de Química. (Tutor)**
Palabras Clave: modelado de procesos de combustión
Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales/Ciencias Químicas/Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica/Físicoquímica Orgánica.
Referencias adicionales: Uruguay/Español, Tipo de orientación: Tutor principal

Tesis de doctorado

- Pablo Dans** Modelado de las características estructurales y mecanismo de acción molecular de compuestos de Pd(II) y Pt(II) con potencial acción antineoplásica. 2009. **Tesis (Doctorado en Química (UDELAR-PEDECIBA)), UDELAR - Universidad de la República - Facultad de Química. (Tutor)**
Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales/Ciencias Químicas/Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica/Química Teórica y Computacional.
Referencias adicionales: Uruguay/Español, Tipo de orientación: Tutor principal
El estudiante concluyó la producción para la tesis doctoral a inicios de 2006. Entregó la versión final del documento de tesis (aprox. 200 pp.) que fue enviada a la Comisión de Posgrado de Facultad de Química en agosto 2007. Entre esa fecha y octubre 2008 el candidato rindió y aprobó 2 exámenes pendientes de asignaturas de su plan de estudios. Desarrolló la defensa de la tesis el 12/12/08 (Tribunal O. Ventura, D. Estrín y H. Cerecetto) aprobando con nivel excelente. El fallo del tribunal fue homologado en marzo 2009 por el Consejo de Facultad de Química.

Tesis/Monografía de grado

- Tamara Meirelles** Efectos de la glicación del residuo K16 sobre la estructura y propiedades fisicoquímicas del fragmento 10-35 del péptido beta-amiloide. 2009. **Tesis/Monografía de grado, Licenciatura en Bioquímica, UDELAR - Universidad de la República - Facultad de Ciencias. (Tutor)**
Palabras Clave: modelado de la glicación de péptidos y proteínas; Simulaciones de dinámica molecular; Cálculos mixtos ONIOM DFT/AMBER
Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales/Ciencias Químicas/Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica/Química Computacional, péptidos y glicación en patologías.
Referencias adicionales: Uruguay/Español
Tesina de graduación de la Licenciatura en Bioquímica - Un mínimo de 90 hs de actualización bibliográfica y un mínimo de 280 hs de trabajo de experimental de investigación, con presentación de reporte final en formato artículo, evaluado externamente. Calificación final: 11/12
- Vanessa Leone** Análisis Comparativo del mecanismo de reacción del glioxal con metilamina y aminoguanidina y el papel del solvente en ellos: una primer aproximación a las etapas iniciales de la gliación y su inhibición. 2005. **Tesis/Monografía de grado, Licenciatura en Bioquímica, UDELAR - Universidad de la República - Facultad de Ciencias. (Tutor)**
Palabras Clave: modelado de reacciones de aminas con glioxal; papel del agua como catalizador; modelos cuánticos y PCM
Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales/Ciencias Químicas/Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica/Físicoquímica Orgánica.
Referencias adicionales: Uruguay/Español
Trabajo Especial II del Plan 1992 de la Licenciatura 280 hs de actividad de investigación mínimas Trabajo en formato artículo científico, aprox. 30 pp Calificación 12/12

3 Vanessa Leone Fuente de la juventud: compuestos inhibidores del envejecimiento natural y patológico asociado a glucosilación no enzimática. 2004. Tesis/Monografía de grado, Licenciatura en Bioquímica, UDELAR - Universidad de la República - Facultad de Ciencias. (Tutor)

Palabras Clave: glicación, envejecimiento y patologías
Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales/Ciencias Biológicas/Bioquímica y Biología Molecular/Bases moleculares del envejecimiento y patologías de concentración.
Referencias adicionales: Uruguay/Español
Trabajo Especial I del Plan 1992 de la Licenciatura 90 hs de actividad de búsqueda y actualización bibliográfica monografía de aprox. 100 pp Calificación 12/12

4 Sylvia Vázquez Cationes radicales convencionales y distónicos y su relación con el mecanismo de reacciones catalizadas por el sistema enzima-coenzima B12. 2002. Tesis/Monografía de grado, Licenciatura en Bioquímica, UDELAR - Universidad de la República - Facultad de Ciencias. (Tutor)

Palabras Clave: catálisis por sistemas enzima/B12; radicales convencionales y distónicos
Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales/Ciencias Químicas/Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica/Procesos enzimáticos radicalarios.
Referencias adicionales: Uruguay/Español
Trabajo Especial I - Plan 1992 de la Licenciatura en Bioquímica Iniciado en 2000 y culminado en 2002. Calificación final 8/12

5 Alexandra Castro Análisis de la reactividad intrínseca de nucleobases en secuencias de ADN relevantes frente a la acción de los fármacos anticancerígenos Cisplatino y Mitomicina C. 2002. Tesis/Monografía de grado, Licenciatura en Bioquímica, UDELAR - Universidad de la República - Facultad de Ciencias. (Tutor)

Palabras Clave: reactividad de ADN; modulación del entorno local y global; Modelado potenciales ionización
Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales/Ciencias Biológicas/Bioquímica y Biología Molecular/Química Teórica y Computacional, Bioinformática estructural.
Referencias adicionales: Uruguay/Español
Trabajo Especial II del Plan 1992 de la Licenciatura 280 hs de actividad de investigación mínimas Trabajo en formato artículo científico, aprox. 30 pp Calificación 10/12

6 Pablo Dans Modelado de la unión covalente entre fármacos para el tratamiento del cáncer de la familia de Cisplatino y el ADN: análisis de la viabilidad molecular de compuestos alternativos de Pd(II). 2001. Tesis/Monografía de grado, Licenciatura en Bioquímica, UDELAR - Universidad de la República - Facultad de Ciencias. (Tutor)

Palabras Clave: Modelado unión Cisplatino-ADN
Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales/Ciencias Químicas/Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica/Modelado de Compuestos Inorgánicos y su unión al ADN.
Referencias adicionales: Uruguay/Español
Trabajo Especial II del Plan 1992 de la Licenciatura 280 hs de actividad de investigación mínimas Trabajo en formato artículo científico, aprox. 30 pp Calificación 12/12

7 Alexandra Castro Química del daño de ADN causado por acción de radicales oxigenados y nitrogenados. 2001. Tesis/Monografía de grado, Licenciatura en Bioquímica, UDELAR - Universidad de la República - Facultad de Ciencias. (Tutor)

Palabras Clave: daño oxidativo de ADN; ROS y RNS
Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales/Ciencias Biológicas/Bioquímica y Biología Molecular/daño de ADN
Referencias adicionales: Uruguay/Español
Trabajo Especial I - Plan 1992 Licenciatura en Bioquímica 90 hs de revisión y actualización bibliográfica Monografía de aprox. 80 páginas Calificación obtenida 11/12

8 Pablo Dans Modelos teórico-computacionales para el estudio de sistemas bioquímicos. 2000. Tesis/Monografía de grado, Licenciatura en Bioquímica, UDELAR - Universidad de la República - Facultad de Ciencias. (Tutor)

Palabras Clave: Métodos de modelado para sistemas bioquímicos
Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales/Ciencias Químicas/Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica/Química Teórica y Computacional.
Referencias adicionales: Uruguay/Español
Trabajo Especial I - Plan de Estudios 1992. 90 horas de búsqueda y actualización bibliográfica en el tema elegido. Documento final de 80 páginas. Calificación obtenida 12/12

Evaluaciones

Proyectos

Año	2006-2006
Institución Financiadora	CONICYT(Uruguay)
Cantidad	Menos de 5
Observaciones	Evaluación de Perfiles y Proyectos para la convocatoria del CONICYT del año 2006 en el área Básica
Año	2006-2006
Institución Financiadora	CSIC(Uruguay)
Cantidad	De 5 a 20
Observaciones	Integrante de la Comisión Evaluadora del Área Básica - Convocatoria a Proyectos I+D y de iniciación a la investigación 2006.

Otros datos Relevantes

Premios y títulos

- 2004** Mejor trabajo (poster) de sesión en el Simposio de Biología Molecular y Bioquímica, Sociedad Uruguaya de Biociencias - Sociedad de Biología Molecular y Bioquímica
- 1999** Premio CONICYT-TWAS al mejor joven investigador del país en el área Química, CONICYT-TWAS
- 1995** Minnesota Supercomputer Institute International Research Scholar, Minnesota Supercomputer Institute, Univ. Minnesota
- 1994** Investigador Honorario Grado 5 (Primer Nivel) -PEDECIBA-Química, PEDECIBA-Química
- 1992** Premio Folia Chimica Theoretica Latina (cuarta edición) - Mejor trabajo de actualización publicado en el bienio, Folia Chimica Theoretica Latina
- 1991** Investigador Honorario Grado 3 PEDECIBA Química, PEDECIBA-Área Química

Jurado/Integrante de comisiones evaluadoras de trabajos académicos

Tesis

- 1 Elena L. Coitiño; E. Laura Coitiño; E. L. Coitiño Participación en comités de *Damián Scherlis*.
xx. 2002. Tesis (Ciencias Químicas), U.B.A. - Universidad de Buenos Aires.
Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales/Ciencias Químicas/Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica/Química Computacional, hemoproteínas.
Referencias adicionales: Argentina/Español

Presentaciones en eventos

- 1 XXXIV Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina 2008. (Participación en eventos/Congreso).
Referencias adicionales: Uruguay; Nombre del evento: XXXIV Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina;
Nombre de la institución promotora: Asociación Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina.

[Volver](#)

Indicadores de producción

	Total
Producción bibliográfica	25
Artículos publicados en revistas científicas	24
Completo en revistas arbitradas	23
Completo en revistas NO arbitradas	1
Trabajos en eventos	1
Resumen expandido	1

	Total
Producción técnica	8
Productos tecnológicos	4
Software	4
Otra producción técnica	4

	Total
Evaluaciones	2
Proyectos	2

	Total
Formación de RRHH	11
Tutorías/Orientaciones/Supervisiones concluidas	11
Tesis de doctorado	1
Tesis de maestría	2
Otros tipos	8

	Total
Otros datos Relevantes	2
Jurado/Integrante de comisiones evaluadoras de trabajos académicos	1
Participación en eventos	1

[Volver](#)
