

Buenos Aires, 01 de abril de 2024

**Sres. Miembros de la Comisión de Doctorado.**

**Facultad de Ciencias Exactas y Naturales**

**UBA**

**S./D.**

---

De mi mayor consideración,

Tengo el agrado de dirigirme a Uds. a fin de avalar la presentación a la Carrera de Doctorado de la Universidad de Buenos Aires del Lic. Julio Franco Aguilera. El tema propuesto es “TECNOLOGÍAS GENÓMICAS Y TRANSCRIPTÓMICAS APLICADAS AL DIAGNÓSTICO DE PATOLOGÍAS POCO FRECUENTE DE LA GLÁNDULA TIROIDES” y se desarrollará en el QB10, Instituto Nacional de Química Biológica de la Facultad de Ciencias Exactas y Naturales de la Universidad de Buenos Aires (INQUIBICEN-FCEyN-UBA) bajo mi dirección.

Sin otro particular, saluda a Uds. muy atte.

A handwritten signature in black ink, appearing to read 'Martí', with a long horizontal stroke extending to the right.

Dr. Marcelo Martí

# **Curriculum vitae**

## **DATOS PERSONALES**

**Nombre:** Marcelo Adrián Martí

**Fecha de nacimiento:** 11 de julio de 1979

**Lugar de nacimiento:** Provincia de BS AS Argentina

**Nacionalidad:** Argentino

**D.N.I:** 27 374 819

**Dirección:** Sgto. Cabral 1557 Martínez C.P. 1640

**Teléfono:** 4799-9022, Cel 15-5758-1800

**Dirección laboral:** ciudad universitaria pabellon II

**Teléfono laboral:** 4576-3378-79 y 80.

**E-mail:** *marti.marcelo@gmail.com*

**Lugar de trabajo:** Dto. de Química Biológica e IQUIBCEN, FCEN, UBA

## **FORMACIÓN ACADEMICA:**

**Carrera del Investigador:** Investigador Principal del CONICET con Fecha de Ingreso a la CIC Marzo **2008**.

**Doctor de la Universidad de Buenos Aires**, Fecha de defensa: 24 de Noviembre del **2006**.

**Licenciado en ciencias biológicas:** Promedio: 9.05 (Dic **2002**) Orientación: Biología Molecular y Biotecnología

## **ANTECEDENTES DOCENTES:**

**Cargo actual:** Profesor Asociado Dedicación Exclusiva en el el Departamento de Química Biológica FCEN UBA desde Noviembre 2022 (interino desde 2016)

## **Cargos de Gestión Universitaria**

Director del Departamento de Química Biológica FCEN UBA 2016-2019

## **Cargos docentes previos:**

**Cargo actual: Profesor Adjunto Dedicación Exclusiva Regular** en el el Departamento de Química Biológica FCEN UBA desde Marzo 2013 (Interino desde Junio **2010**).

**Jefe de Trabajos Prácticos Regular** con dedicación simple en el el Departamento de Química Biológica FCEN UBA desde 2do cuat. 2007 - 2010.

**Jefe de Trabajos Prácticos Regular con dedicación simple** en el el Departamento de Química Inorgánica Analítica y Química Física FCEN UBA 2do cuat 2005 a 1er cuat 2007.

**Ayudante de 1ra** con dedicación simple en el Departamento de Química Inorgánica Analítica y Química Física FCEN UBA año 2003, 2do cuat 2004, y 1er cuat 2005

**Ayudante de 2da** con dedicación simple en el Departamento de Química Inorgánica Analítica y Química Física FCEN UBA 2do Cuat 2002

**Ayudante de 2da** con dedicación simple en el Departamento de Fisiología y Biología Molecular FCEN UBA durante los años 2001 y 2002.

## **Participación/creación de Materias:**

Durante mi desarrollo como profesor del departamento he dictado clases regularmente en las siguientes materias: i) Química Biológica, ii) Química Biológica 2B (Estructura y Función de Biomoléculas), iii) Introducción a la Bioinformática Molecular, iv) Química Biológica 2 v) Bioinformática Avanzada, y en los siguientes cursos de posgrado: i) Bioinformática, ii) Bioinformática Avanzada, iii) Bioinformática Aplicada al diseño de fármacos, iv) Simulación Computacional de Biomoléculas (compartida con QI), v) Escuela de Genómica Clínica.

En 2011 creamos junto con el Dr Turjanski la materia/curso de posgrado Introducción a la Bioinformática Molécula / Bioinformática que se dicta anualmente con entre 40-100 alumnos.

En 2019 cree la Materia/curso de posgrado Bioinformática Avanzada que se dicta anualmente y en sus tres ediciones ha tenido entre 10-20 alumnos.

En 2015 cree la Escuela de Genómica Clínica, actualmente curso de posgrado y primer curso de formación profesional de la FCEN, que se dicta anualmente con entre 60-80 alumnos.

## **ANTECEDENTES CIENTIFICOS: Publicaciones en revistas internacionales con referato**

1. **Wide transition-state ensemble as key component for enzyme catalysis.** Gabriel E Jara, Francesco Pontiggia, Renee Otten, Roman V Agafonov, Marcelo A Martí\*, Dorothee Kern\*. ELife 2023; 12:RP93099. DOI: <https://doi.org/10.7554/eLife.93099>
2. **Monitoring Dynamic Conformations of a Single Fluorescent Molecule Inside a Protein Cavity.** Sosa S, Szalai AM, Lopez LF, Prieto JM, Zaza C, Adamczyk AK, Bonomi HR, Marti MA, Acuna GP, Goldbaum FA, Stefani FD. Small Methods. 2025 Feb 2:e2402114. doi: 10.1002/smt.202402114. Online ahead of print. PMID: 39895187
3. **Study of the impact of ClinGen Revisions on ACMG/AMP variant semi-automatic classification for Rare Diseases diagnosis.** Rius A, Aguirre N, Erra L, Brunello FG, Biagioli G, Zaiat J, Marti MA. Clin Chim Acta. 2025 Jan 30;566:120065. doi: 10.1016/j.cca.2024.120065. Epub 2024 Nov 29. PMID: 39615735
4. **Extreme Phenotypic Variability of ACTG1-Related Disorders in Hearing Loss.** Bernardi MT, Ramzan M, Calderon L, Salvatore F, De Rosa MA, Bivona S, Armando R, Vazquez N, Azcoiti ME, Marti MA, Arberas C, Ropelato MG, Olha S, Lam BL, Telischi FF, Tekin M, Walz K. Adv Genet (Hoboken). 2024 Dec 5;5(4):2400040. doi: 10.1002/ggn.202400040. eCollection 2024 Dec. PMID: 39734360 Free PMC article.
5. **Phosphorylation Mechanism Switching in Histidine Kinases Is a Tool for Fast Protein Evolution: Insights From AlphaFold Models.** Olivieri FA, Marti MA, Wetzler DE. Proteins. 2024 Nov;92(11):1276-1286. doi: 10.1002/prot.26708. Epub 2024 Jun 17. PMID: 38884545
6. **Knockout mice with pituitary malformations help identify human cases of hypopituitarism.** Martinez-Mayer J, Brinkmeier ML, O'Connell SP, Ukagwu A, Marti MA, Miras M, Forclaz MV, Benzrihen MG, Cheung LYM, Camper SA, Ellsworth BS, Raetzman LT, Pérez-Millán MI, Davis SW. Genome Med. 2024 May 31;16(1):75. doi: 10.1186/s13073-024-01347-y. PMID: 38822427 Free PMC article.
7. **Exome Sequencing has a high diagnostic rate in sporadic congenital hypopituitarism and reveals novel candidate genes.** Martinez-Mayer J, Vishnopoliska S, Perticarari C, Garcia LI, Hackbart M, Martinez M, Zaiat J, Jacome-Alvarado A, Braslavsky D, Keselman A, Bergadá I, Marino R, Ramírez P, Garrido NP, Ciaccio M, Di Palma MI, Belgorosky A, Forclaz MV, Benzrihen G, D'Amato S, Cirigliano ML, Miras M, Nuñez AP, Castro L, Mallea-Gil MS, Ballarino C, Latorre-Villacorta L, Casiello AC, Hernandez C, Figueroa V, Alonso G, Morin A, Guntsche Z, Lee H, Lee E, Song Y, Marti MA, Perez-Millan MI. J Clin Endocrinol Metab. 2024 May 8:dgae320. doi: 10.1210/clinem/dgae320. Online ahead of print. PMID: 38717911
8. **Bacterial cytochrome P450s: a bioinformatics odyssey of substrate discovery.** Schottlender G, Prieto JM, Clemente C, Schuster CD, Dumas V, Fernández Do Porto D, Martí MA. Front Microbiol. 2024 Feb 7;15:1343029. doi: 10.3389/fmicb.2024.1343029. ECollection 2024. PMID: 38384262 Free PMC article.
9. **Globin phylogeny, evolution and function, the newest update.** Schuster CD, Salvatore F, Moens L, Martí MA. Proteins. 2024 Jan 9. doi: 10.1002/prot.26659. Online ahead of print. PMID: 38192262
10. **Local energetic frustration conservation in protein families and superfamilies.** Freiburger MI, Ruiz-Serra V, Pontes C, Romero-Durana M, Galaz-Davison P, Ramírez-Sarmiento CA, Schuster CD, Marti MA, Wolynes PG, Ferreira DU, Parra RG, Valencia A. Nat Commun. 2023 Dec 16;14(1):8379. doi: 10.1038/s41467-023-43801-2. PMID: 38104123 Free PMC article.

11. **Editorial: Protein recognition and associated diseases.** Gromiha MM, Kundrotas P, Marti MA, Venclovas Č, Li M. *Front Bioinform.* 2023 May 22;3:1215141. doi: 10.3389/fbinf.2023.1215141. ECollection 2023. PMID: 37283696 Free PMC article. No abstract available.
12. **Best Practices on QM/MM Simulations of Biological Systems.** Clemente CM, Capece L, Martí MA. *J Chem Inf Model.* 2023 May 8;63(9):2609-2627. doi: 10.1021/acs.jcim.2c01522. Epub 2023 Apr 26. PMID: 3710003.
13. **An allosteric switch ensures efficient unidirectional information transmission by the histidine kinase DesK from *Bacillus subtilis*.** Lima S, Blanco J, Olivieri F, Imelio JA, Nieves M, Carrión F, Alvarez B, Buschiazzi A, Marti MA, Trajtenberg F. *Sci Signal.* 2023 Jan 24;16(769):eabo7588. doi: 10.1126/scisignal.abo7588. Epub 2023 Jan 24. PMID: 36693130
14. **The interplay between serine proteases and caspase-1 regulates the autophagy-mediated secretion of Interleukin-1 beta in human neutrophils.** Keitelman IA, Shiromizu CM, Zgajnar NR, Danielián S, Jancic CC, Martí MA, Fuentes F, Yancoski J, Vera Aguilar D, Rosso DA, Goris V, Buda G, Katsicas MM, Galigniana MD, Galletti JG, Sabbione F, Trevani AS. *Front Immunol.* 2022 Aug 25;13:832306. doi: 10.3389/fimmu.2022.832306. ECollection 2022. PMID: 36091026
15. **Solvent Sites Improve Docking Performance of Protein-Protein Complexes and Protein-Protein Interface-Targeted Drugs.** Mayol GF, Defelipe LA, Arcon JP, Turjanski AG, Marti MA. *J Chem Inf Model.* 2022 Aug 8;62(15):3577-3588. doi: 10.1021/acs.jcim.2c00264. Epub 2022 Jul 19. PMID: 35853201
16. **Cosolvent Sites-Based Discovery of Mycobacterium Tuberculosis Protein Kinase G Inhibitors.** Burastero O, Defelipe LA, Gola G, Tateosian NL, Lopez ED, Martinena CB, Arcon JP, Traian MD, Wetzler DE, Bento I, Barril X, Ramirez J, Marti MA, Garcia-Alai MM, Turjanski AG. *J Med Chem.* 2022 Jul 28;65(14):9691-9705. doi: 10.1021/acs.jmedchem.1c02012. Epub 2022 Jun 23. PMID: 35737472
17. **Delayed Puberty Due to a WDR11 Truncation at Its N-Terminal Domain Leading to a Mild Form of Ciliopathy Presenting With Dissociated Central Hypogonadism: Case Report.** Castro S, Brunello FG, Sansó G, Scaglia P, Esnaola Azcoiti M, Izquierdo A, Villegas F, Bergadá I, Ropelato MG, Martí MA, Rey RA, Grinspon RP. *Front Pediatr.* 2022 Jun 3;10:887658. doi: 10.3389/fped.2022.887658. ECollection 2022. PMID: 35722485
18. **Type 1 Insulin-Like Growth Factor Receptor Nuclear Localization in High-Grade Glioma Cells Enhances Motility, Metabolism, and In Vivo Tumorigenesis.** Martin A, Fernandez MC, Cattaneo ER, Schuster CD, Venara M, Clément F, Berenstein A, Lombardi MG, Bergadá I, Gutierrez M, Martí MA, Gonzalez-Baro MR, Pennisi PA. *Front Endocrinol (Lausanne).* 2022 Apr 27;13:849279. doi: 10.3389/fendo.2022.849279. ECollection 2022. PMID: 35574033
19. **Mycobacterium tuberculosis DosS binds H<sub>2</sub>S through its Fe<sup>3+</sup> heme iron to regulate the DosR dormancy regulon.** Sevalkar RR, Glasgow JN, Pettinati M, Marti MA, Reddy VP, Basu S, Alipour E, Kim-Shapiro DB, Estrin DA, Lancaster JR Jr, Steyn AJC. *Redox Biol.* 2022 Jun;52:102316. doi: 10.1016/j.redox.2022.102316. Epub 2022 Apr 20. PMID: 35489241.
20. **Specificity and Reactivity of Mycobacterium tuberculosis Serine/Threonine Kinases PknG and PknB.** Burastero O, Cabrera M, Lopez ED, Defelipe LA, Arcon JP, Durán R, Marti MA, Turjanski AG. *J Chem Inf Model.* 2022 Apr 11;62(7):1723-1733. doi: 10.1021/acs.jcim.1c01358. Epub 2022 Mar 23.
21. **MotSASi: Functional short linear motifs (SLiMs) prediction based on genomic single nucleotide variants and structural data.** Martín M, Brunello FG, Modenutti CP, Nicola JP, Marti MA. *Biochimie.* 2022 Feb 5;197:59-73. doi: 10.1016/j.biochi.2022.02.002. Online ahead of print. PMID: 35134457
22. **Gp29 LysA of mycobacteriophage TM4 can hydrolyze peptidoglycan through an N-acetyl-muramoyl-L-alanine amidase activity.** Urdániz E, Martín M, Payaslián F, Defelipe LA, Dodes M, Martinez M, Alzari PM, Cabrera G, Martí MA, Piuri M. *Biochim Biophys Acta Proteins Proteom.* 2022 Feb 1;1870(2):140745. doi: 10.1016/j.bbapap.2021.140745. Epub 2021 Dec 11.
23. **A Remote Secondary Binding Pocket Promotes Heteromultivalent Targeting of DC-SIGN.**

Wawrzinek R, Wamhoff EC, Lefebvre J, Rentzsch M, Bachem G, Domeniconi G, Schulze J, Fuchsberger FF, Zhang H, Modenutti C, Schnirch L, Marti MA, Schwarzt O, Bräutigam M, Guberman M, Hauck D, Seeberger PH, Seitz O, Titz A, Ernst B, Rademacher C. *J Am Chem Soc.* 2021 Nov 17;143(45):18977-18988. doi: 10.1021/jacs.1c07235. Epub 2021 Nov 8.

24. **High-throughput splicing assays identify missense and silent splice-disruptive POU1F1 variants underlying pituitary hormone deficiency.** Gergics P, Smith C, Bando H, Jorge AAL, Rockstroh-Lippold D, Vishnopoliska SA, Castinetti F, Maksutova M, Carvalho LRS, Hoppmann J, Martínez Mayer J, Albarel F, Braslavsky D, Keselman A, Bergadá I, Martí MA, Saveanu A, Barlier A, Abou Jamra R, Guo MH, Dauber A, Nakaguma M, Mendonca BB, Jayakody SN, Ozel AB, Fang Q, Ma Q, Li JZ, Brue T, Pérez Millán MI, Arnhold IJP, Pfäeffle R, Kitzman JO, Camper SA. *Am J Hum Genet.* 2021 Jul 12:S0002-9297(21)00237-8. doi: 10.1016/j.ajhg.2021.06.013.
25. **From Genome to Drugs: New Approaches in Antimicrobial Discovery.** Serral F, Castello FA, Sosa EJ, Pardo AM, Palumbo MC, Modenutti C, Palomino MM, Lazarowski A, Auzmendi J, Ramos PIP, Nicolás MF, Turjanski AG, Martí MA, Fernández Do Porto D. *Front Pharmacol.* 2021 Jun 9;12:647060. doi: 10.3389/fphar.2021.647060. ECollection 2021. PMID: 34177572 Free PMC article. Review.
26. **Structural modeling of a novel membrane-bound globin-coupled sensor in *Geobacter sulfurreducens*.** Hammerschmid D, Germani F, Drusin SI, Fagnen C, Schuster CD, Hoogewijs D, Marti MA, Venien-Bryan C, Moens L, Van Doorslaer S, Sobott F, Dewilde S. *Comput Struct Biotechnol J.* 2021 Mar 26;19:1874-1888. doi: 10.1016/j.csbj.2021.03.031. eCollection 2021.
27. **A Novel SLC5A5 Variant Reveals the Crucial Role of Kinesin Light Chain 2 in Thyroid Hormonogenesis.** Martín M, Modenutti CP, Gil Rosas ML, Peyret V, Geysels RC, Bernal Barquero CE, Sobrero G, Muñoz L, Signorino M, Testa G, Miras MB, Masini-Repiso AM, Calcaterra NB, Coux G, Carrasco N, Martí MA, Nicola JP. *J Clin Endocrinol Metab.* 2021 Jun 16;106(7):1867-1881. doi: 10.1210/clinem/dgab283.
28. **Biased Docking for Protein-Ligand Pose Prediction.** Arcon JP, Turjanski AG, Martí MA, Forli S. *Methods Mol Biol.* 2021;2266:39-72. doi: 10.1007/978-1-0716-1209-5\_3.
29. **Comprehensive Identification of Pathogenic Gene Variants in Patients With Neuroendocrine Disorders.** Vishnopoliska SA, Mercogliano MF, Camilletti MA, Mortensen AH, Braslavsky D, Keselman A, Bergadá I, Olivieri F, Miranda L, Marino R, Ramírez P, Pérez Garrido N, Patiño Mejia H, Ciaccio M, Di Palma MI, Belgorosky A, Martí MA, Kitzman JO, Camper SA, Pérez-Millán MI. *J Clin Endocrinol Metab.* 2021 Jun 16;106(7):1956-1976. doi: 10.1210/clinem/dgab177. PMID: 33729509
30. **Oculocutaneous albinism type 1B associated with a functionally significant tyrosinase gene polymorphism detected with Whole Exome Sequencing.** Mendez R, Iqbal S, Vishnopoliska S, Martinez C, Dibner G, Aliano R, Zaiat J, Biagioli G, Fernandez C, Turjanski A, Campbell AJ, Mercado G, Marti MA. *Ophthalmic Genet.* 2021 Jun;42(3):291-295. doi: 10.1080/13816810.2021.1888129. Epub 2021 Feb 18.
31. **Conformational and Reaction Dynamic Coupling in Histidine Kinases: Insights from Hybrid QM/MM Simulations.** Olivieri FA, Burastero O, Drusin SI, Defelipe LA, Wetzler DE, Turjanski A, Marti J. *Chem Inf Model.* 2020 Feb 24;60(2):833-842. doi: 10.1021/acs.jcim.9b00806. Epub 2020 Feb 5. PMID: 31923359
32. **Aromatic clusters in protein-protein and protein-drug complexes.** Lanzarotti E, Defelipe LA, Marti MA, Turjanski AG. *J Cheminform.* 2020 May 8;12(1):30. doi: 10.1186/s13321-020-00437-4.
33. **Clamping, bending, and twisting inter-domain motions in the misfold-recognizing portion of UDP-glucose: Glycoprotein glucosyltransferase.** Modenutti CP, Blanco Capurro JI, Ibba R, Alonzi DS, Song MN, Vasiljević S, Kumar A, Chandran AV, Tax G, Marti L, Hill JC, Lia A, Hensen M, Waksman T, Rushton J, Rubichi S, Santino A, Martí MA, Zitzmann N, Roversi P. *Structure.* 2021 Apr 1;29(4):357-370.e9. doi: 10.1016/j.str.2020.11.017. Epub 2020 Dec 21.
34. **Inflammatory cutaneous lesions and pulmonary manifestations in a new patient with autosomal recessive ISG15 deficiency** Buda G, Valdez RM, Biagioli G, Olivieri FA, Affranchino N, Bouso C, Lotersztejn V, Bogunovic D, Bustamante J, Martí MA. *Allergy Asthma Clin Immunol.* 2020 Sep 3;16:77. doi: 10.1186/s13223-020-00473-7. eCollection 2020.

35. **The Transcription Factor NF- $\kappa$ B Mediates Thyrotropin-Stimulated Expression of Thyroid Differentiation Markers.** Geysels RC, Peyret V, Martín M, Nazar M, Reale C, Bernal Barquero CE, Miranda L, Martí MA, Vito P, Masini-Repiso AM, Nicola JP. *Thyroid*. 2021 Feb;31(2):299-314. doi: 10.1089/thy.2020.0208. Epub 2020 Oct 21.
36. **The Underlying Mechanism of HNO Production by the Myoglobin-Mediated Oxidation of Hydroxylamine.** Álvarez L, Suárez SA, González PJ, Brondino CD, Doctorovich F, Martí MA. *Inorg Chem*. 2020 Jun 15;59(12):7939-7952. doi: 10.1021/acs.inorgchem.9b02750. Epub 2020 May 21.
37. **Systemic Type I IFN Inflammation in Human ISG15 Deficiency Leads to Necrotizing Skin Lesions.** Martin-Fernandez M, Bravo García-Morato M, Gruber C, Murias Loza S, Malik MNH, Alsohime F, Alakeel A, Valdez R, Buta S, Buda G, Marti MA, Larralde M, Boisson B, Feito Rodriguez M, Qiu X, Chrabieh M, Al Ayed M, Al Muhsen S, Desai JV, Ferre EMN, Rosenzweig SD, Amador-Borrero B, Bravo-Gallego LY, Olmer R, Merkert S, Bret M, Sood AK, Al-Rabiaah A, Temsah MH, Halwani R, Hernandez M, Pessler F, Casanova JL, Bustamante J, Lionakis MS, Bogunovic D. *Cell Rep*. 2020 May 12;31(6):107633. doi: 10.1016/j.celrep.2020.107633.
38. **Spastic ataxia with eye-of-the-tiger-like sign in 4 siblings due to novel compound heterozygous AFG3L2 mutation.** Calandra CR, Buda G, Vishnopolaska SA, Oliveri J, Olivieri FA, Pérez Millán MI, Biagioli G, Miquelini LA, Pellene AL, Marti MA. *Parkinsonism Relat Disord*. 2020 Apr;73:52-54. doi: 10.1016/j.parkreldis.2020.03.020. Epub 2020 Mar 24.
39. **Structure and function of crocodilian hemoglobins and allosteric regulation by chloride, ATP, and CO<sub>2</sub>.** Fago A, Natarajan C, Pettinati M, Hoffmann FG, Wang T, Weber RE, Drusin SI, Issoglio F, Martí MA, Estrin D, Storz JF. *Am J Physiol Regul Integr Comp Physiol*. 2020 Mar 1;318(3):R657-R667. doi: 10.1152/ajpregu.00342.2019. Epub 2020 Feb 5.
40. **The Structural Biology of Galectin-Ligand Recognition: Current Advances in Modeling Tools, Protein Engineering, and Inhibitor Design.** Modenutti CP, Capurro JIB, Di Lella S, Martí MA. *Front Chem*. 2019 Dec 3;7:823. doi: 10.3389/fchem.2019.00823. ECollection 2019. PMID: 31850312 Free PMC article. Review.
41. **Kinase Activation by Small Conformational Changes.** Lopez ED, Burastero O, Arcon JP, Defelipe LA, Ahn NG, Marti MA, Turjanski AG. *J Chem Inf Model*. 2020 Feb 24;60(2):821-832. doi: 10.1021/acs.jcim.9b00782. Epub 2019 Nov 27.
42. **Cosolvent-Based Protein Pharmacophore for Ligand Enrichment in Virtual Screening.** Arcon JP, Defelipe LA, Lopez ED, Burastero O, Modenutti CP, Barril X, Marti MA, Turjanski AG. *J Chem Inf Model*. 2019 Aug 26;59(8):3572-3583. doi: 10.1021/acs.jcim.9b00371. Epub 2019 Aug 16.
43. **AutoDock Bias: improving binding mode prediction and virtual screening using known protein-ligand interactions.** Arcon JP, Modenutti CP, Avendano D, Lopez ED, Defelipe LA, Alessandra Ambrosio F, Turjanski AG, Forli S, Marti MA. *Bioinformatics*. 2019 Mar 2. pii: btz152. doi: 10.1093/bioinformatics/btz152. [Epub ahead of print]
44. **Gordon Holmes Syndrome Caused by RNF216 Novel Mutation in 2 Argentinean Siblings.** Calandra CR, Mocarbel Y, Vishnopolaska SA, Toneguzzo V, Oliveri J, Cazado EC, Biagioli G, Turjanski AG, Marti M. *Mov Disord Clin Pract*. 2019 Jan 16;6(3):259-262. doi: 10.1002/mdc3.12721. eCollection 2019
45. **Solvents to Fragments to Drugs: MD Applications in Drug Design.** Defelipe LA, Arcon JP, Modenutti CP, Marti MA, Turjanski AG, Barril X. *Molecules*. 2018 Dec 11;23(12). pii: E3269. doi: 10.3390/molecules23123269. Review.
46. **Reactive nitrogen and oxygen species: Friend or foe in the tuberculosis fight.** Galizia J, Martí MA. *Tuberculosis (Edinb)*. 2018 Dec;113:175-176. doi: 10.1016/j.tube.2018.10.001. Epub 2018 Oct 11. No abstract available.
47. **VarQ: A Tool for the Structural and Functional Analysis of Human Protein Variants.** Radusky L, Modenutti C, Delgado J, Bustamante JP, Vishnopolaska S, Kiel C, Serrano L, Marti M, Turjanski A. *Front Genet*. 2018 Dec 6;9:620. doi: 10.3389/fgene.2018.00620. eCollection 2018.

48. **A Carboxy-Terminal Monoleucine-Based Motif Participates in the Basolateral Targeting of the Na<sup>+</sup>/I<sup>-</sup> Symporter.** Martín M, Modenutti CP, Peyret V, Geysels RC, Darrouzet E, Pourcher T, Masini-Repiso AM, Martí MA, Carrasco N, Nicola JP. *Endocrinology*. 2019 Jan 1;160(1):156-168. doi: 10.1210/en.2018-00603.
49. **An efficient use of X-ray information, homology modeling, molecular dynamics and knowledge-based docking techniques to predict protein-monosaccharide complexes.** Blanco Capurro JI, Di Paola M, Gamarra MD, Martí MA, Modenutti CP. *Glycobiology*. 2019 Feb 1;29(2):124-136. doi: 10.1093/glycob/cwy102.
50. **Genetics and genomic medicine in Argentina.** Vishnopolka SA, Turjanski AG, Herrera Piñero M, Groisman B, Liascovich R, Chiesa A, Marti MA. *Mol Genet Genomic Med*. 2018 Jul 26. doi: 10.1002/mgg3.455. [Epub ahead of print]
51. **An optimized methodology for whole genome sequencing of RNA respiratory viruses from nasopharyngeal aspirates.** Goya S, Valinotto LE, Tittarelli E, Rojo GL, Nabaes Jodar MS, Greninger AL, Zaiat JJ, Marti MA, Mistchenko AS, Viegas M. *PLoS One*. 2018 Jun 25;13(6):e0199714. doi: 10.1371/journal.pone.0199714. ECollection 2018.
52. **Target-Pathogen: a structural bioinformatic approach to prioritize drug targets in pathogens.** Sosa EJ, Burguener G, Lanzarotti E, Defelipe L, Radusky L, Pardo AM, Marti M, Turjanski AG, Fernández Do Porto D. *Nucleic Acids Res*. 2018 Jan 4;46(D1):D413-D418. doi: 10.1093/nar/gkx1015.
53. **Next generation sequencing panel based on single molecule molecular inversion probes for detecting genetic variants in children with hypopituitarism.** Pérez Millán MI, Vishnopolka SA, Daly AZ, Bustamante JP, Seilicovich A, Bergadá I, Braslavsky D, Keselman AC, Lemons RM, Mortensen AH, Marti MA, Camper SA, Kitzman JO. *Mol Genet Genomic Med*. 2018 May 8. doi: 10.1002/mgg3.395. [Epub ahead of print]
54. **Evaluation of nitroxyl donors' effect on mycobacteria.** Galizia J, Acosta MP, Urdániz E, Martí MA, Piuri M. *Tuberculosis (Edinb)*. 2018 Mar;109:35-40. doi: 10.1016/j.tube.2018.01.006. Epub 2018 Feb 13.
55. **Understanding the molecular basis of the high oxygen affinity variant human hemoglobin Coimbra.** Jorge SE, Bringas M, Petruk AA, Arrar M, Marti MA, Skaf MS, Costa FF, Capece L, Sonati MF, Estrin D. *Arch Biochem Biophys*. 2018 Jan 1;637:73-78. doi: 10.1016/j.abb.2017.11.010. Epub 2017 Dec 1.
56. **HNO Is Produced by the Reaction of NO with Thiols.** Suarez SA, Muñoz M, Alvarez L, Venâncio MF, Rocha WR, Bikiel DE, Marti MA, Doctorovich F. *J Am Chem Soc*. 2017 Oct 18;139(41):14483-14487. doi: 10.1021/jacs.7b06968. Epub 2017 Oct 4.
57. **Multiscale approach to the activation and phosphotransfer mechanism of CpxA histidine kinase reveals a tight coupling between conformational and chemical steps.** Marsico F, Burastero O, Defelipe LA, Lopez ED, Arrar M, Turjanski AG, Marti MA. *Biochem Biophys Res Commun*. 2018 Mar 29;498(2):305-312. doi: 10.1016/j.bbrc.2017.09.039. Epub 2017 Sep 11.
58. **Tertiary and quaternary structural basis of oxygen affinity in human hemoglobin as revealed by multiscale simulations.** Bringas M, Petruk AA, Estrin DA, Capece L, Martí MA. *Sci Rep*. 2017 Sep 7;7(1):10926. doi: 10.1038/s41598-017-11259-0.
59. **Structural and mechanistic comparison of the Cyclopropane Mycolic Acid Synthases (CMAS) protein family of Mycobacterium tuberculosis.** Defelipe LA, Osman F, Marti MA, Turjanski AG. *Biochem Biophys Res Commun*. 2018 Mar 29;498(2):288-295. doi: 10.1016/j.bbrc.2017.08.119. Epub 2017 Aug 30.
60. **LigQ: A Webserver to Select and Prepare Ligands for Virtual Screening.** Radusky L, Ruiz-Carmona S, Modenutti C, Barril X, Turjanski AG, Martí MA. *J Chem Inf Model*. 2017 Jul 27. doi: 10.1021/acs.jcim.7b00241.
61. **Germline hypomorphic CARD11 mutations in severe atopic disease.** Ma CA, Stinson JR, Zhang Y, Abbott JK, Weinreich MA, Hauk PJ, Reynolds PR, Lyons JJ, Nelson CG, Ruffo E, Dorjbal B, Glauzy S, Yamakawa N, Arjunaraja S, Voss K, Stoddard J, Niemela J, Zhang Y, Rosenzweig SD, McElwee JJ, DiMaggio T, Matthews HF, Jones N, Stone KD, Palma A, Oleastro M, Prieto E, Bernasconi AR, Dubra G, Danielian S, Zaiat J, Marti MA, Kim B, Cooper MA, Romberg N, Meffre E, Gelfand EW, Snow AL, Milner JD. *Nat Genet*. 2017 Aug;49(8):1192-1201. doi: 10.1038/ng.3898. Epub 2017 Jun 19.

62. **Tyrosine oxidation and nitration in transmembrane peptides is connected to lipid peroxidation.** Bartesaghi S, Herrera D, Martinez DM, Petruk A, Demicheli V, Trujillo M, Martí MA, Estrín DA, Radi R. *Arch Biochem Biophys.* **2017** May 15;622:9-25. doi: 10.1016/j.abb.2017.04.006. Epub 2017 Apr 13.
63. **Molecular Dynamics in Mixed Solvents Reveals Protein-Ligand Interactions, Improves Docking, and Allows Accurate Binding Free Energy Predictions.** Arcon JP, Defelipe LA, Modenutti CP, López ED, Alvarez-Garcia D, Barril X, Turjanski AG, Martí MA. *J Chem Inf Model.* 2017 Apr 24;57(4):846-863. doi: 10.1021/acs.jcim.6b00678. Epub **2017** Mar 31.
64. **Heme oxygenase-1 in the forefront of a multi-molecular network that governs cell-cell contacts and filopodia-induced zippering in prostate cancer.** Paez AV, Pallavicini C, Schuster F, Valacco MP, Giudice J, Ortiz EG, Anselmino N, Labanca E, Binaghi M, Salierno M, Martí MA, Cotignola JH, Woloszynska-Read A, Bruno L, Levi V, Navone N, Vazquez ES, Gueron G. *Cell Death Dis.* **2016** Dec 29;7(12):e2570. doi: 10.1038/cddis.2016.420.
65. **Regulation of signaling directionality revealed by 3D snapshots of a kinase:regulator complex in action.** Trajtenberg F, Imelio JA, Machado MR, Larrieux N, Marti MA, Obal G, Mechaly AE, Buschiazso A. *Elife.* **2016** Dec 12;5. pii: e21422. doi: 10.7554/eLife.21422.
66. **Theoretical Insights into the Reaction and Inhibition Mechanism of Metal-Independent Retaining Glycosyltransferase Responsible for Mycothiol Biosynthesis.** Blanco Capurro JI, Hopkins CW, Pierdominici Sottile G, González Lebrero MC, Roitberg AE, Marti MA. *J Phys Chem B.* 2017 Jan 26;121(3):471-478. doi: 10.1021/acs.jpcc.6b10130. Epub **2017** Jan 13.
67. **Steered Molecular Dynamics Methods Applied to Enzyme Mechanism and Energetics.** Ramírez CL, Martí MA, Roitberg AE. *Methods Enzymol.* **2016**;578:123-43. doi: 10.1016/bs.mie.2016.05.029.
68. **Coarse-Grained Simulations of Heme Proteins: Validation and Study of Large Conformational Transitions.** Ramírez CL, Petruk A, Bringas M, Estrin DA, Roitberg AE, Marti MA, Capece L. *J Chem Theory Comput.* **2016**
69. **Mechanism of the Reaction of Human Manganese Superoxide Dismutase with Peroxynitrite: Nitration of Critical Tyrosine 34.** Demicheli V, Moreno DM, Jara GE, Lima A, Carballal S, Ríos N, Batthyany C, Ferrer-Sueta G, Quijano C, Estrín DA, Martí MA, Radi R. *Biochemistry.* **2016** Jun 21;55(24):3403-3417.
70. **A quantitative model for oxygen uptake and release in a family of hemeproteins.** Bustamante JP, Szretter ME, Sued M, Martí MA, Estrin DA, Boechi L. *Bioinformatics.* **2016** Jun 15;32(12):1805-13. doi: 10.1093/bioinformatics/btw083. Epub 2016 Feb 15.
71. **Structural Study of a Flexible Active Site Loop in Human Indoleamine 2,3-Dioxygenase and Its Functional Implications.** Álvarez L, Lewis-Ballester A, Roitberg A, Estrin DA, Yeh SR, Marti MA, Capece L. *Biochemistry.* **2016** May 17;55(19):2785-93. doi: 10.1021/acs.biochem.6b00077. Epub 2016 May 6.
72. **Rapid Whole-Cell Assay of Antitubercular Drugs Using Second-Generation Fluoromycobacteriophages.** Urdániz E, Rondón L, Martí MA, Hatfull GF, Piuri M. *Antimicrob Agents Chemother.* **2016** Apr 22;60(5):3253-6. doi: 10.1128/AAC.03016-15.
73. **Structural Insights into the HWE Histidine Kinase Family: The Brucella Blue Light-Activated Histidine Kinase Domain.** Rinaldi J, Arrar M, Sycz G, Cerutti ML, Berguer PM, Paris G, Estrín DA, Martí MA, Klink S, Goldbaum FA. *J Mol Biol.* **2016** Mar 27;428(6):1165-79. doi: 10.1016/j.jmb.2016.01.026.
74. **A whole genome bioinformatic approach to determine potential latent phase specific targets in Mycobacterium tuberculosis.** Defelipe LA, Do Porto DF, Pereira Ramos PI, Nicolás MF, Sosa E, Radusky L, Lanzarotti E, Turjanski AG, Marti MA. *Tuberculosis (Edinb).* **2016** Mar;97:181-92. doi: 10.1016/j.tube.2015.11.009.



75. **Evolutionary and Functional Relationships in the Truncated Hemoglobin Family.** Bustamante JP, Radusky L, Boechi L, Estrin DA, Ten Have A, Martí MA. *PLoS Comput Biol.* **2016** Jan 20;12(1):e1004701. Doi: 10.1371/journal.pcbi.1004701. eCollection 2016 Jan.
76. **CG2AA: backmapping protein coarse-grained structures.** Lombardi LE, Martí MA, Capece L. *Bioinformatics.* **2016** Apr 15;32(8):1235-7. doi: 10.1093/bioinformatics/btv740.
77. **Efficient Calculation of Enzyme Reaction Free Energy Profiles Using a Hybrid Differential Relaxation Algorithm: Application to Mycobacterial Zinc Hydrolases.** Romero JM, Martin M, Ramirez CL, Dumas VG, Marti MA. *Adv Protein Chem Struct Biol.* **2015**;100:33-65. doi: 10.1016/bs.apcsb.2015.06.006.
78. **Discussing endogenous NO(•)/HNO interconversion aided by phenolic drugs and vitamins.** Hamer M, Suarez SA, Neuman NI, Alvarez L, Muñoz M, Marti MA, Doctorovich F. *Inorg Chem.* **2015** Oct 5;54(19):9342-50. doi: 10.1021/acs.inorgchem.5b01347.
79. **WATCLUST: a tool for improving the design of drugs based on protein-water interactions.** López ED, Arcon JP, Gauto DF, Petruk AA, Modenutti CP, Dumas VG, Marti MA, Turjanski AG. *Bioinformatics.* **2015** Nov 15;31(22):3697-9. doi: 10.1093/bioinformatics/btv411. Epub 2015 Jul 20.
80. **Whole genome sequencing reveals a de novo SHANK3 mutation in familial autism spectrum disorder.** Nemirovsky SI, Córdoba M, Zaiat JJ, Completa SP, Vega PA, González-Morón D, Medina NM, Fabbro M, Romero S, Brun B, Revale S, Ogara MF, Pecci A, Marti M, Vazquez M, Turjanski A, Kauffman MA. *PLoS One.* **2015** Feb 3;10(2):e0116358. doi: 10.1371/journal.pone.0116358.
81. **Nitric oxide is reduced to HNO by proton-coupled nucleophilic attack (PCNA) by ascorbate, tyrosine, and other alcohols. A new route to HNO in biological media?** Suarez SA, Neuman NI, Muñoz M, Alvarez L, Bikiel DE, Brondino C, Ivanović-Burmazović I, Miljkovic JL, Filipovic MR, Marti MA, Doctorovich F. *J Am Chem Soc.* **2015** Mar 15.
82. **Protein Topology Determines Cysteine Oxidation Fate: The Case of Sulfenyl Amide Formation among Protein Families.** Defelipe LA, Lanzarotti E, Gauto D, Marti MA, Turjanski AG. *PLoS Comput Biol.* **2015** Mar 5;11(3):e1004051. doi: 10.1371/journal.pcbi.1004051.
83. **Molecular mechanism of myoglobin autoxidation: insights from computer simulations.** Arcon JP, Rosi P, Petruk AA, Marti MA, Estrin DA. *J Phys Chem B.* **2015** Feb 5;119(5):1802-13. doi: 10.1021/jp5093948. Epub 2015 Jan 27.
84. **Engineered chimeras reveal the structural basis of hexacoordination in globins: a case study of neuroglobin and myoglobin.** Boron I, Capece L, Pennacchietti F, Wetzler DE, Bruno S, Abbruzzetti S, Chisari L, Luque FJ, Viappiani C, Marti MA, Estrin DA, Nadra AD. *Biochim Biophys Acta.* **2015** Jan;1850(1):169-77. doi: 10.1016/j.bbagen.2014.10.006.
85. **Underlying thermodynamics of pH-dependent allostery.** Di Russo NV, Martí MA, Roitberg AE. *J Phys Chem B.* **2014** Nov 13;118(45):12818-26. doi: 10.1021/jp507971v. Epub 2014 Oct 31.
86. **Using crystallographic water properties for the analysis and prediction of lectin-carbohydrate complex structures.** Modenutti C, Gauto D, Radusky L, Blanco J, Turjanski A, Hajos S, Marti M. *Glycobiology.* **2015** Feb;25(2):181-96. doi: 10.1093/glycob/cwu102. Epub 2014 Sep 28.
87. **Reactions of HNO with metal porphyrins: underscoring the biological relevance of HNO.** Doctorovich F, Bikiel DE, Pellegrino J, Suárez SA, Martí MA. *Acc Chem Res.* **2014** Oct 21;47(10):2907-16. doi: 10.1021/ar500153c.
88. **Improving Efficiency in SMD Simulations Through a Hybrid Differential Relaxation Algorithm** Claudia L. Ramírez , Ari Zeida, Gabriel E. Jara, Adrián E. Roitberg, and Marcelo A. Martí. *J. Chem. Theory Comput.*, **2014**, 10 (10), pp 4609–4617
89. **Heme-oxygenase-1 implications in cell morphology and the adhesive behavior of prostate cancer cells.** Gueron G, Giudice J, Valacco P, Paez A, Elguero B, Toscani M, Jaworski F, Leskow FC, Cotignola J, Marti MA, Binaghi M, Navone N, Vazquez E. *Oncotarget.* **2014** Jun 30;5(12):4087-102.

90. **H<sub>2</sub>S and NO cooperatively regulate vascular tone by activating a neuroendocrine HNO–TRPA1–CGRP signalling pathway.** Mirjam Eberhardt, Maria Dux, Barbara Namer, Jan Miljkovic Tatjana I. Kichko, Jeanne de la Roche, Michael Fischer, Sebastian A. Suarez, Damian Bikiel, Karola Dorsch, Andreas Leffler, Alexandru Babes, Angelika Lampert, Jochen K. Lennerz, Johannes Jacobi, Marcelo A. Marti, Ivana Ivanovic-Burmazovic, Nada Cordasic, Christine Will, Fabio Doctorovich, Edward D. Hogestat, Peter M. Zygmunt, Karl Messlinger, Peter Reeh<sup>2</sup> & Milos R. Filipovi. *Nature Communications* **2014** 5:4381, DOI: 10.1038/ncomms5381.
91. **Redox Potential Determines the Reaction Mechanism of HNO Donors with Mn and Fe Porphyrins: Defining the Better Traps.** Alvarez L, Suarez SA, Bikiel DE, Reboucas JS, Batinić-Haberle I, Martí MA, Doctorovich F. *Inorg Chem.* **2014** Jul 8. [Epub ahead of print]
92. **Mechanistic Insight into the Enzymatic Reduction of Truncated Hemoglobin N of Mycobacterium tuberculosis: Role of the CD Loop and Pre-A motif in Electron Cycling.** Singh S, Thakur N, Oliveira A, Petruk AA, Hade MD, Sethi D, Bidon-Chanal A, Marti MA, Datta H, Parkesh R, Estrin DA, Luque FJ, Dikshit KL. *J Biol Chem.* **2014** Jun 13. pii: jbc.M114.578187.
93. **TuberQ: a Mycobacterium tuberculosis protein druggability database.** Radusky L, Defelipe LA, Lanzarotti E, Luque J, Barril X, Marti MA, Turjanski AG. *Database (Oxford).* **2014** May 8;2014(0):bau035. doi: 10.1093/database/bau035. Print 2014.
94. **Structural and molecular basis of the peroxynitrite-mediated nitration and inactivation of Trypanosoma cruzi iron-superoxide dismutases (Fe-SODs) A and B: disparate susceptibilities due to the repair of Tyr35 radical by Cys83 in Fe-SODB through intramolecular electron transfer.** Martinez A, Peluffo G, Petruk AA, Hugo M, Piñeyro D, Demicheli V, Moreno DM, Lima A, Batthyány C, Durán R, Robello C, Martí MA, Larrieux N, Buschiazzi A, Trujillo M, Radi R, Piacenza L. *J Biol Chem.* **2014** May 2;289(18):12760-78. doi: 10.1074/jbc.M113.545590.
95. **Draft Genome Sequence of the Polyextremophilic Halorubrum sp. Strain AJ67, Isolated from Hyperarsenic Lakes in the Argentinian Puna.** Burguener GF, Maldonado MJ, Revale S, Fernández Do Porto D, Rascován N, Vázquez M, Farías ME, Marti MA, Turjanski AG. *Genome Announc.* **2014** Feb 6;2(1). pii: e01096-13. doi: 10.1128/genomeA.01096-13.
96. **QM/MM study of the C-C coupling reaction mechanism of CYP121, an essential Cytochrome p450 of Mycobacterium tuberculosis.** Dumas VG, Defelipe LA, Petruk AA, Turjanski AG, Marti MA. *Proteins.* **2013** Nov 12. doi: 10.1002/prot.24474. [Epub ahead of print]
97. **Time-resolved electrochemical quantification of azanone (HNO) at low nanomolar level.** Suárez SA, Bikiel DE, Wetzler DE, Martí MA, Doctorovich F. *Anal Chem.* **2013** Nov 5;85(21):10262-9. doi: 10.1021/ac402134b. Epub 2013 Sep 3.
98. **Small ligand-globin interactions: Reviewing lessons derived from computer simulation.** Capece L, Boechi L, Perissinotti LL, Arroyo-Mañez P, Bikiel DE, Smulevich G, Marti MA, Estrin DA *Biochim Biophys Acta.* **2013** Mar 5.
99. **The allosteric modulation of thyroxine-binding globulin affinity is entropy driven.** Petruk AA, Labanda MS, Alvarez RM, Marti MA. *Biochim Biophys Acta.* **2013**.
100. **Hydrophobic effect drives oxygen uptake in myoglobin via histidine E7.** Boechi L, Arrar M, Martí MA, Olson JS, Roitberg AE, Estrin DA. *J Biol Chem.* **2013** Mar 1;288(9):6754-62. **2013**.
101. **Quaternary structure effects on the hexacoordination equilibrium in rice hemoglobin rHb1: Insights from molecular dynamics simulations.** Morzan UN, Capece L, Marti MA, Estrin DA. *Proteins, Struct Func & Bioinf.* **2013** May;81(5):863-73.
102. **Molecular dynamics simulations provide atomistic insight into hydrogen exchange mass spectrometry experiments,** Petruk, A.A., Defelipe, L.A., Rodríguez Limardo, R.G., Bucci, H., Marti, M.A., Turjanski, A.G. *Journal of Chemical Theory and Computation* 9 (1) , pp. 658-669 **2013**
103. **Role of PheE15 gate in ligand entry and nitric oxide detoxification function of Mycobacterium tuberculosis truncated hemoglobin N.** Ana Oliveira, Sandeep Singh, Axel Bidon-Chanal, Flavio Forti,

Marcelo A. Marti, Leonardo Boechi, Dario A. Estrin, Kanak L. Dikshit and F. Javier Luque. *Plos One* 2012

104. **The key role of water in the dioxygenase function of Escherichia coli flavohemoglobin.** D Ferreiro, L Boechi, D Estrin and MA Marti. *J. Inorg Biochem* **2013** Feb;119:75-84.
105. **pH-Dependent Conformational Changes in Proteins and Their Effect on Experimental pK(a)s: The Case of Nitrophorin 4.** Di Russo NV, Estrin DA, Martí MA, Roitberg AE. *PLoS Comput Biol.* 2012 Nov;8(11)
106. **Solvent structure improves docking prediction in Lectin-Carbohydrate complexes.** Gauto DF, Petruk AA, Modenutti CP, Blanco JI, Di Lella S, Martí MA. *Glycobiology.* 2012 Oct 22.
107. **Molecular basis of intramolecular electron transfer in proteins during radical-mediated oxidations: Computer simulation studies in model tyrosine-cysteine peptides in solution.** Petruk AA, Bartesaghi S, Trujillo M, Estrin DA, Murgida D, Kalyanaraman B, Marti MA\*, Radi R.\* *Arch Biochem Biophys.* 2012 \*) Autor correspondiente
108. **The NtrY/X two-component system of Brucella spp. acts as a redox sensor and regulates the expression of nitrogen respiration enzymes.** Carrica MD, Fernandez I, Martí MA, Paris G, Goldbaum FA. *Mol Microbiol.* 2012
109. **Complete Reaction Mechanism of Indoleamine 2,3-Dioxygenase as Revealed by QM/MM Simulations.** Capece L, Lewis-Ballester A, Yeh SR, Estrin DA, Marti MA.\* *J Phys Chem B.* 2012 Feb 2;116(4):1401-13. \*) Autor correspondiente
110. **Nitroxyl (azanone) trapping by metalloporphyrins.** Doctorovich, F., Bikiel, D., Pellegrino, J., Suárez, S.A., Larsen, A., Martí, M.A. *Coordination Chemistry Reviews* **2011**, 255 (23-24) , pp. 2764-2784
111. **Molecular basis for the substrate stereoselectivity in tryptophan dioxygenase.** Capece L, Lewis-Ballester A, Marti MA, Estrin DA, Yeh SR. *Biochemistry.* **2011** Dec 20;50(50):10910-8.
112. **Structural model for p75 NTR-TrkA intracellular domain interaction: A combined FRET and bioinformatics study,** Iacarusio, M.F., Galli, S., Martí, M., Villalta, J.I., Estrin, D.A., Jares-Erijman, E.A., Pietrasanta, L.I. *Journal of Molecular Biology* **2011** 414 (5) , pp. 681-698
113. **Draft genome sequence of Bizionia argentinensis, isolated from Antarctic surface water.** Lanzarotti E, Pellizza L, Bercovich A, Foti M, Coria SH, Vazquez SC, Ruberto L, Hernández EA, Dias RL, Mac Cormack WP, Cicero DO, Smal C, Nicolas MF, Vasconcelos AT, Marti MA, Turjanski AG. *J Bacteriol.* **2011** Dec;193(23):6797-8.
114. **Ligand migration in Methanosarcina acetivorans protoglobin: effects of ligand binding and dimeric assembly.** Forti F, Boechi L, Bikiel D, Martí MA, Nardini M, Bolognesi M, Viappiani C, Estrin D, Luque FJ. *J Phys Chem B.* **2011** Nov 24;115(46):13771-80.
115. **A protective protein matrix improves the discrimination of nitroxyl from nitric oxide by MnIII protoporphyrinate IX in aerobic media.** Boron I, Suárez SA, Doctorovich F, Martí MA, Bari SE. *J Inorg Biochem.* **2011** Aug;105(8):1044-9.
116. **An integrated computational analysis of the structure, dynamics, and ligand binding interactions of the human galectin network.** Guardia CM, Gauto DF, Di Lella S, Rabinovich GA, Martí MA,\* Estrin DA.\* *J Chem Inf Model.* **2011** Aug 22;51(8):1918-30. \*) Autor correspondiente
117. **Aromatic-aromatic interactions in proteins: beyond the dimer.** Lanzarotti E, Biekofsky RR, Estrin DA, Marti MA,\* Turjanski AG.\* *J Chem Inf Model.* **2011** Jul 25;51(7):1623-33. \*) Autor correspondiente
118. **Comparing and combining implicit ligand sampling with multiple steered molecular dynamics to study ligand migration processes in heme proteins.** Forti F, Boechi L, Estrin DA, Marti MA.\* *J Comput Chem.* **2011** \*) Autor correspondiente
119. **Role of the Distal Hydrogen-Bonding Network in Regulating Oxygen Affinity in the truncated hemoglobin III from Campylobacter jejuni.** Arroyo Mañez P, Lu C, Boechi L, Marti MA, Shepherd M, Wilson JL, Poole RK, Luque FJ, Yeh SR, Estrin DA. *Biochemistry.* **2011**

120. **Structural basis for ligand recognition in a mushroom lectin: solvent structure as specificity predictor.** Gauto DF, Di Lella S, Estrin DA, Monaco HL, Martí MA. *Carbohydr Res.* **2011**, 15;346(7):939-48. \*) Autor correspondiente
121. **Protonation of histidine 55 affects the oxygen access to heme in the alpha chain of the hemoglobin from the Antarctic fish *Trematomus bernacchii*.** Boechi L, Martí MA, Vergara A, Sica F, Mazzarella L, Estrin DA, Merlino A. *IUBMB Life.* **2011**; 63(3):175-82.
122. **Biological activity and ligand binding mode to the progesterone receptor of A-homo analogues of progesterone.** Alvarez LD, Dansey MV, Martí MA, Bertucci PY, Di Chenna PH, Pecci A, Burton G. *Bioorg Med Chem.* **2011**;19(5):1683-91.
123. **p38 $\gamma$  Activation Triggers Dynamical Changes in Allosteric Docking Sites.** Rodriguez Limardo RG, Ferreira DN, Roitberg AE, Martí MA, Turjanski AG. *Biochemistry.* **2011**, **50**(8):1384-95.
124. **Exploring the molecular basis of human manganese superoxide dismutase inactivation mediated by tyrosine 34 nitration.** Moreno DM, Martí MA, De Biase PM, Estrin DA, Demicheli V, Radi R, Boechi L. *Arch Biochem Biophys.* **2011**, 5;507(2):304-9.
125. **Ligand Migration in the Apolar Tunnel of *Cerebratulus lacteus* Mini-Hemoglobin.** Pesce A, Nardini M, Dewilde S, Capece L, Martí MA, Congia S, Salter MD, Blouin GC, Estrin DA, Ascenzi P, Moens L, Bolognesi M, Olson JS. *J Biol Chem.* **2011**, 286(7):5347-58.
126. **The peculiar heme pocket of the 2/2 hemoglobin of cold-adapted *Pseudoalteromonas haloplanktis* TAC125.** Howes BD, Giordano D, Boechi L, Russo R, Mucciacciaro S, Ciaccio C, Sinibaldi F, Fittipaldi M, Martí MA, Estrin DA, di Prisco G, Coletta M, Verde C, Smulevich G. *J Biol Inorg Chem.* **2011** 16(2):299-311.
127. **Protein dynamics and ligand migration interplay as studied by computer simulation.** Arroyo-Mañez P, Bikiel DE, Boechi L, Capece L, Di Lella S, Estrin DA,\* Martí MA,\* Moreno DM, Nadra AD, Petruk AA. *Biochim Biophys Acta.* **2010** \*) Autores correspondientes.
128. **Insights on glucocorticoid receptor activity modulation through the binding of rigid steroids.** Presman DM, Alvarez LD, Levi V, Eduardo S, Digman MA, Martí MA, Veleiro AS, Burton G, Pecci A. *PLoS One.* **2010** Oct 11;5(10)
129. **Linking structure and thermal stability of the  $\beta$ -galactoside-binding protein galectin-1 to ligand binding and dimerization equilibria.** Santiago Di Lella, Marcelo A. Martí Diego O. Croci, Carlos M. A. Guardia, Juan C. Díaz-Ricci, Gabriel A. Rabinovich Julio J. Caramelo and Darío A. Estrin. *Biochemistry* **2010**, 49(35) 7652-8..
130. **Substrate Stereo-specificity in Tryptophan dioxygenase and Indoleamine 2,3- dioxygenase.** L. Capece, M. Arrar, A. Roitberg, Syun-Ru Yeh, M. A. Martí\* and Dario Estrin.\* *Proteins, struct. Func. And Bioinformatics.* **2010**, 78(14) 2961-72. \*) Autor correspondiente.
131. **Inhibitory effect of quercetin on matrix metalloproteinase 9 activity. Molecular mechanism and structure-activity relationship of the flavonoid-enzyme interaction.** Alejandra C. Saragusti, María G. Ortega, José L. Cabrera, Darío A. Estrin, Marcelo A. Martí,\* Gustavo A. Chiabrando\* *European Journal of Pharmacology* **2010**. 644, 138-45. \*)Autor Correspondiente.
132. **Probing The Chemotaxis Periplasmic Sensor Domains from *G. sulfurreducens* by Combined Resonance Raman and Molecular Dynamic Approaches: NO and CO Sensing.** T. Catarino, M Pessanha, A. De Candia, Z. Gouveia, A.P. Fernandes, P. R Pokkuluri, DH Murgida, MA. Martí, S Todorovic, CA. Salgueiro. *J. Phys. Chem. B.* **2010**, 114(34) 11251-60
133. **A surface effect allows HNO / NO discrimination at the nanomolar level by a cobalt porphyrin bound to gold.** Sebastián A. Suárez, Mariano H. Fonticelli, Aldo A. Rubert, Ezequiel de la Llave, Damián Scherlis, Roberto C. Salvarezza, Marcelo A. Martí and Fabio Doctorovich,\* *Inorg Chem.* **2010**. 49(15), 6955-66.

134. **Role of heme distortion on oxygen affinity in heme proteins: the protoglobin case.** Damián E. Bikiel, Flavio Forti, Leonardo Boechi, Marco Nardini, F. Javier Luque, Marcelo A. Martí\*, and Darío A. Estrin\*. *J. Phys. Chem. B.* **2010.** 114(25) 8536-43 \*)Autor Correspondiente.
135. **Molecular Basis of Coupled Protein and Electron Transfer Dynamics of Cytochrome c in Biomimetic Complexes.** Damián Alvarez-Paggi, Diego F. Martín, Pablo M. De Biase, Peter Hildebrandt, Marcelo A. Martí\* and Daniel H. Murgida. *J. Am. Chem. Soc.* **2010.**;132(22):7820 \*) Autor correspondiente
136. **The First Step of the Dioxygenation Reaction Carried Out by Tryptophan Dioxygenase and Indoleamine 2,3-Dioxygenase as revealed by QM/MM Studies.** Luciana Capece; Ariel Lewis-Ballester, Dipanwita Batabyal, Natali Di Russo; Syun-Ru Yeh<sup>3</sup>, Dario A. Estrin and Marcelo A. Martí.\* *Accepted J. Biol. Inorg. Chem.* **2010.** 15(6) 811-23. \*) Autor Correspondiente.
137. **Thermal Fluctuations Determine the Electron Transfer Rates of Cytochrome c in Electrostatic and Covalent Complexes.** Hoang Khoa Ly, Marcelo A. Martí, Diego F. Martín, Damian Alvarez-Paggi, Wiebke Meister, Anja Kranich, Inez M. Weidinger, Peter Hildebrandt, Daniel H. Murgida. *Chem. Phys. Chem.* **2010.** 11(6):1225-35. .
138. **Unraveling the molecular basis for ligand binding in truncated hemoglobin: the trHbO *B. subtilis* case.** Leonardo Boechi, Pau Arroyo Mañé, Javier Luque, Marcelo A. Martí and Dario A. Estrin. *Proteins, Struct. Func. And Bioinf.* **2010** ;**78(4):962-70.**
139. **Molecular Basis for the Electric Field Modulation of Cytochrome c Structure and Function.** De Biase, P.; Alvarez Paggi, D; Doctorovich, F; Hildebrandt, P; Estrin, D. A; Murgida, D,H; Martí, M,A. *J. Am. Chem. Soc.* **2009.** 131 (44), 16248-56 \*) Autor Correspondiente.
140. **Evidence for a Ferryl Intermediate in a Heme-based Dioxygenase.** Ariel Lewis-Ballester, Dipanwita Batabyal, Tsuyoshi Egawa, Changyuan Lu, Yu Lin, Marcelo A. Martí, Luciana Capece, Dario A. Estrin and Syun-Ru Yeh. *Proc. Natl. Acad. Sci USA.* **2009,** 106(41) 17371-17376.
141. **Thyroid Hormones Interactions with DMPC bilayers. A Molecular Dynamics Study.** Ariel A. Petruk, Marcelo A. Martí\*, and Rosa María S. Alvarez\*. *J. Phys. Chem B.* **2009,** 113(40) 13357-64. \*) *Autor Correspondiente*
142. **Carbohydrate-binding proteins: Dissecting ligand structures through solvent environment occupancy.** Diego F. Gauto, Santiago Di Lella, Carlos M. A. Guardia, Darío A. Estrin and Marcelo A. Martí\*, *J. Phys. Chem B.* **2009** 113(25) 8717-8724. \*) Autor Correspondiente.
143. **Role of Pre-A motif in nitric oxide scavenging by truncated hemoglobin, HbN, of mycobacterium tuberculosis.** Lama A, Pawaria S, Bidon-Chanal A, Anand A, Gelpí JL, Arya S, Martí MA, Estrin DA, Luque FJ, Dikshit KL. *J Biol Chem.* **2009** 284(21), 14457-14468.
144. **The hemoglobins of the sub-Antarctic fish *Cottoperca gobio*, a phylogenetically basal species--oxygen-binding equilibria, kinetics and molecular dynamics.** Giordano D, Boechi L, Vergara A, Martí MA, Samuni U, Dantsker D, Grassi L, Estrin DA, Friedman JM, Mazzarella L, di Prisco G, Verde C. *FEBS J.* **2009** Apr;276(8):2266-77.
145. **Computer simulation and SERR detection of cytochrome c dynamics at SAM-coated electrodes** D Alvarez Paggi, DF. Martín, A Kranich, P Hildebrandt, MA Martí\*, DH Murgida,\*. *Electrochimica Acta.* **2009,** 54(21) 4963-70. \*)Corresponding Author.
146. **Molecular Basis for the pH Dependent Structural Transition of Nitrophorin 4.** Martí MA\*, Estrin DA, Roitberg AE. *J Phys Chem B.* **2009;**113(7):2135-2142. \*)Corresponding Author
147. **pH-dependent mechanism of nitric oxide release in nitrophorins 2 and 4.** Swails JM, Meng Y, Walker FA, Martí MA\*, Estrin DA, Roitberg AE. *J Phys Chem B.* **2009;**113(4):1192-201. \*)Corresponding Author
148. **High pressure reveals structural determinants for globin hexacoordination: Neuroglobin and myoglobin cases.** Capece L, Martí MA, Bidon-Chanal A, Nadra A, Luque FJ, Estrin DA. *Proteins.* **2009,** 75(4) 885-894.

149. **Dynamical characterization of the Heme NO Oxygen binding (H-NOX) domain. Insight into soluble guanylate cyclase allosteric transition** by L. Capece, D.A Estrin and M.A. Marti.\* *Biochemistry* **2008**; 47(37):9793-802. \*)Corresponding Author.
150. **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,\* and D.A. Estrin, *Biochemistry*, **2008**; 47(37):9793-802.
151. **Bond or Cage Effect: How Nitrophorins Transport and Release Nitric Oxide** MA. Marti\*, MC. González Lebrero, AE. Roitberg and DA Estrin. *J. Am. Chem. Soc.*, **2008**; 130(5); 1611-1618. \*) Corresponding Author
152. **The role of residue Thr122 of methylamine dehydrogenase on the proton transfer from the iminoquinone intermediate to residue Asp76.** G. Pierdominici-Sottile, MA. Martí and J. Palma. *Chem Phys Lett.* **2008**, Vol. 456 (4), 243-246
153. **Structural determinants of ligand migration in Mycobacterium tuberculosis truncated hemoglobin O.** Boechi L, Martí MA, Milani M, Bolognesi M, Luque FJ, Estrin DA., *Proteins.* **2008**
154. **Hemisuccinate of 21-hydroxy-6,19-epoxyprogesterone: a tissue-specific modulator of the glucocorticoid receptor.** Alvarez LD, Martí MA, Veleiro AS, Misico RI, Estrin DA, Pecci A, Burton G. *ChemMedChem.* **2008** (12):1869-77
155. **Exploring the Molecular Basis of Action of the Passive Antiglucocorticoid 21-Hydroxy-6,19-epoxyprogesterone** Lautaro D. Álvarez, Marcelo A. Martí, Adriana S. Veleiro, Diego M. Presman, Darío A. Estrin, Adalí Pecci, and Gerardo Burton, *J. Med. Chem.* **2008** 13;51(5):1352-60
156. **Mechanism of Product Release in NO detoxification from Mycobacterium tuberculosis Truncated Hemoglobin N,** MA Martí, A. Bidon-Chanal, A. Crespo, S. Yeh, V. Guallar, F. J. Luque, D. A. Estrin, *J. Am. Chem. Soc.* **2008**; 130(5); 1688-1693.
157. **Exploring the molecular basis of heme coordination in human neuroglobin.** Alejandro D. Nadra, Marcelo A. Martí, Alessandra Pesce, Martino Bolognesi, Darío A. Estrin. *Proteins.* **2008**, 71(2):695-705.
158. **Trapping and characterization of a reaction intermediate in carbapenem hydrolysis by B. cereus metallo-beta-lactamase.** Tioni MF, Llarrull LI, Poeylout-Palena AA, Martí MA, Saggiu M, Periannan GR, Mata EG, Bennett B, Murgida DH, Vila AJ. *J Am Chem Soc.* **2008**;130(47):15852-63.
159. **Characterization of the Galectin-1 Carbohydrate Recognition Domain in Terms of Solvent Occupancy.** Di Lella S, Marti MA, Alvarez RM, Estrin DA, Ricci JC. *J Phys Chem B.* **2007**, 111, (25 ) 7360-7366
160. **Oxygen Affinity Controlled by Dynamical Distal Conformations: The Soybean Leghemoglobin and the Paramecium Caudatum Hemoglobin cases.** Marcelo A. Marti, Luciana Capece, Damian E. Bikiel, Bruno Falcone, and Dario A Estrin. *Proteins* **2007**, 27;68(2):480-487.
161. **Dynamical Regulation of Ligand Migration by a Gate-Opening Molecular Switch in Truncated Hemoglobin-N from Mycobacterium Tuberculosis** Axel Bidon-Chanal, Marcelo A. Martí, Darío A. Estrin, and F. Javier Luque. *J Am Chem Soc.* **2007**, 30;129(21):6782-6788
162. **HNO trapping and assisted decomposition of nitroxyl donors by ferric hemes** Sebastián A. Suárez, Marcelo A. Martí, Pablo M. De Biase, Darío A. Estrin, Sara E. Bari and Fabio Doctorovich. *Polyhedron* **2007**, 26(16):4673-4679
163. **Heme protein oxygen affinity regulation exerted by proximal effects.** Capece L, Marti MA, Crespo A, Doctorovich F, Estrin DA. *J Am Chem Soc.* **2006**,128(38):12455-61
164. **The catalytic mechanism of peptidylglycine alpha-hydroxylating monooxygenase investigated by computer simulation** Crespo A, Marti MA, Roitberg AE, Amzel LM, Estrin DA. *J Am Chem Soc.* **2006**;128(39):12817-28.

165. **Modeling heme proteins using atomistic simulations** Damián E. Bikiel, Leonardo Boechi, Luciana Capece, Alejandro Crespo, Pablo M. De Biase, Santiago Di Lella, Mariano C. González Lebrero, **Marcelo A. Martí**, Alejandro D. Nadra, Laura L. Perissinotti, Damián A. Scherlis and Darío A. Estrin, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **2006**
166. **Ligand-induced dynamical regulation of NO conversion in *Mycobacterium Tuberculosis* truncated-hemoglobin N** Bidon-Chanal, A.\* **Marti, MA.**\* Crespo, A. Milani, M. Orozco, M. Bolognesi, M. Luque, FJ and Estrin DA. *Proteins*, **2006** Aug 1;64(2):457-64. \* Both Authors contributed equally to this work.
167. **Free Energy Calculations with Non-equilibrium Methods: Applications of the Jarzynski Relationship.** Xiong, H. Crespo, A. **Marti, MA.** Estrin DA, Roitberg AE. *Theoretical Chemistry Accounts*, **2006**, 106, 338-346.
168. **Dioxygen affinity in heme proteins investigated by computer simulation.** **Marti MA**, Crespo A, Capece L, Boechi L, Bikiel DE, Scherlis DA, Estrin DA. *J. Inorg. Biochem.* **2006**, 100(4):761-70.
169. **Two distinct heme distal site states define *Cerebratulus lacteus* mini-hemoglobin oxygen affinity.** **Marti MA**, Bikiel DE, Crespo A, Nardini M, Bolognesi M, Estrin DA. *Proteins*. **2006**;62(3):641-8.
170. **Discrimination of Nitroxyl and Nitric Oxide by Water-Soluble Mn(III) Porphyrins** **Marti, M. A.**; Bari, S. E.; Estrin, D. A.; Doctorovich, F.; *J. Am. Chem. Soc.*; **2005**; 127(13); 4680-4684.
171. **Nitric Oxide Interaction with Cytochrome c' and Its Relevance to Guanylate Cyclase. Why Does the Iron Histidine Bond Break?** **Marti, M. A.**; Capece, L.; Crespo, A.; Doctorovich, F.; Estrin, D. A.; *J. Am. Chem. Soc.*; **2005**; 127(21); 7721-7728.
172. **Theoretical study of the truncated hemoglobin HbN: exploring the molecular basis of the NO detoxification mechanism** Alejandro Crespo, **Marcelo A. Martí**, Susana G. Kalko, Antonio Morreale, Modesto Orozco, Jose L. Gelpi, F. Javier Luque, and Darío A. Estrin *J. Am. Chem. Soc.*; **2005**; 127(12); 4433-4444
173. **Multiple-Steering QM-MM Calculation of the Free Energy Profile in Chorismate Mutase** Crespo, A.; **Marti, M. A.**; Estrin, D. A.; Roitberg, A. E.; *J. Am. Chem. Soc.* **2005**; 127(19); 6940-6941.
174. **Proximal Effects on the Modulation of Nitric Oxide Synthase Reactivity: a QM-MM Study** Fernandez M.L., **Marti, M.A.**, Crespo, A. and Estrin D.A. *J Biol Inorg Chem.* **2005**, 10(6): 595-604.
175. **QM-MM Study of Nitrite Reduction by Nitrite Reductase of *Pseudomonas Aeruginosa*** **Marti, M. A.**; Crespo, A.; Bari, S. E.; Doctorovich, F. A.; Estrin, D. A.; *J. Phys. Chem. B*; **2004**; 108(46); 18073-18080.
176. **Modulation of NO Trans Effect in Heme Proteins: Implications in Guanylate Cyclase Activation** **Marcelo A. Martí**, Damián A. Scherlis, Fabio A. Doctorovich, Pablo A. Ordejón and Darío A. Estrin *J Biol Inorg Chem.* **2003** Jul;8(6):595-600.
177. **Fast nitroxyl trapping by ferric porphyrins.** Bari SE, **Marti MA**, Amorebieta VT, Estrin DA, Doctorovich F. *J Am Chem Soc.* **2003**, 125(50):15272-3.
178. **A DFT-Based QM-MM Approach Designed for the Treatment of Large Molecular Systems: Application to Chorismate Mutase** Crespo, A.; Scherlis, D. A.; **Marti, M. A.**; Ordejon, P.; Roitberg, A. E.; Estrin, D. A.; *J. Phys. Chem. B*; **2003**; 107(49); 13728-13736.
179. **Environment Effects on Chemical Reactivity of Heme Proteins** Damián A. Scherlis, Marcelo A. Martí, Pablo Ordejón, Darío A. Estrin *International Journal of Quantum Chemistry*. **2002** Vol 90 1505-14.

## Libros

- 1) **The Chemistry and Biology of Nitroxyl (HNO).**  
Editado por Fabio Doctorovich, Patrick Farmer and Marcelo A. Marti

## Capítulos de Libros

1. **Azanone (HNO) interaction with Hemeproteins and metalloporphyrins**, Doctorovich, F., Bikiel, D.E., Pellegrino, J., Suárez, S.A., Martí, M.A. *Advances in Inorganic Chemistry*, **2012** 64 , pp. 97-139
2. **Structure, Dynamics, and Reactivity of Heme-Proteins from the Globin Superfamily Investigated through Computer Simulation** , P. Arroyo Mañez, L. Boechi, D. E. Bikiel, L. Capece, A.D. Nadra, F. Forti, A. Bidon-Chanal, F. J. Luque, M. A. Marti and D.A. Estrin in *Hemoglobins: recent developments and topics*, edited by M. Nagai, TRP Press, en prensa **2010**.
3. **Exploring the Nitric Oxide Detoxification Mechanism of Mycobacterium tuberculosis Truncated Haemoglobin N**, A. Bidon-Chanal, M.A. Marti, D.A. Estrin, and F.J. Luque. In *Self organization of Molecular system: From Molecules and Clusters to Nanotubes and Proteins*. Edited by N Russo, VY Antochenko and E Kryachko. NATO Science for Peace and Security Series A: Chemistry and Biology. Springer **2009**, p33-47.
4. **NO reactivity with globins as investigated through computer simulation. M.A. Marti**, L. Capece, A. Bidon-Chanal, A. Crespo, V. Guallar, F.J. Luque, and D. A. Estrin. *Globins and Other Nitric Oxide-Reactive Proteins, Part B* Edited by R.k Poole for *Methods in Enzymology Volumen 437* Páginas 477-98 Elsevier **2008** .

## Trabajos publicados en Revistas Nacionales o de Divulgación

1. **SIMULACIÓN COMPUTACIONAL DE BIOMOLÉCULAS. UN PUNTO DE ENCUENTRO ENTRE LA FÍSICO-QUÍMICA Y LA BIOLOGÍA COMPUTACIONAL**, Marcelo A. Martí *Anales Acad. Nac. de Cs. Ex., Fís. y Nat.*, tomo 65 (2013): 0-0.
2. **La bioinformática estructural o la realidad virtual de los medicamentos**. Marcelo A. Martí y Adrian A. Turjanski. *Química Viva*, Número 1, Año 8, Abril 2009.

## Participación en congresos Nacionales e Internacionales (últimos 5 años)

1. **VIII REUNIÓN DE LA SOCIEDAD LATINOAMERICANA DE TUBERCULOSIS Y OTRAS MICOBACTERIOSIS (SLAMTB)** Rosario Argentina Noviembre 2016 “Bioinformatic approach to determine potential Nitrosative Stress related targets in Mycobacterium tuberculosis”. *Marcelo A. Marti*. (Comunicación oral)
2. **CRG@Course: FROM GENE TO FUNCTION: GENOME EDITING TOOLS 30/11-4/12 2015 Centre Recerca genòmica (CRG)** Barcelona, “From protein to disease: A physicochemical journey” *Marcelo A. Marti*. (Comunicación oral)
3. **3rd Brazilian School of Molecular Modeling (EBMM)** Santo André - São Paulo, Brazil, 29th of June to 03th of July **2015**. “Determination of Enzymatic Reaction Mechanism using QM/MM simulations” *Marcelo A. Marti*. (Comunicación oral)

## Nacionales

4. **9° Congreso Bioquímico, Rosario 2018** Caracterización de exomas y otras aplicaciones de Genómica Clínica *Marcelo A. Marti* (comunicación oral)
5. **Reunión Conjunta de Sociedades de Biociencias, 13-17 Nov 2017**, Buenos Aires Argentina. *Bioinformatic Applications: Where Biophysics and Genomics Meet*, *Marcelo A. Marti* (comunicación oral) **Congreso Argentino de Glicobiología. GlycoAR Cordoba 2016** “Glycoinformatics. Development and application of in-silico tools to study lectin-carbohydrate complexes.” *Marcelo A. Marti* (comunicación oral)

## Dirección y/o participación en subsidios

1. **Director Subsidio Genómica Clínica de Enfermedades Poco Frecuentes (GeC-EpoF)**, Proyectos de Redes Federales de Alto Impacto, CONVE 2023-100390147-APN-MCT.



2. **Director Subsidio** “Utilización de “sitios de solvente” para mejorar la performance de los métodos de docking. Expansion a regiones de interacción proteína-proteína e incorporación de potenciales basados en Aprendizaje Automático” **PICT-2021-I-A-00216**
3. **Director Subsidio** “Utilización de sitios de solvente para mejorar la performance de los métodos de docking.” **PICT-2018-01769, Monto 1.170.000 \$**
4. **Director del Subsidio** Functional studies of novel variants associated with Autoinflammatory Diseases, as revealed by PAMPA project. **Novartis Independent Non-Clinical Investigator Initiated Research. 2020 Monto 20.400 USD.**
5. **Director del Subsidio** “Utilización de sitios de solvente para mejorar la performance de los métodos de docking. Aplicaciones a la predicción de complejos proteína-ligando, proteína-proteína y búsqueda virtual de nuevos ligandos. **UBACyT 2020 Mod I 20020190100081BA Monto 500.000\$**
6. **Investigador Participante del subsidio** “Genómica Clínica de Enfermedades Pediátricas (GCEP)” **FS-BIO 2017 Medicina de Precisión (Rsol 2017-547-APN-DANPCYT#MCT) \$22.507.000**
7. **Director del Subsidio** “Desarrollo de nuevas tecnologías de secuenciación genómica para mejora del diagnóstico molecular y el tratamiento de la insuficiencia hormonal hipofisaria” **PICT Start-Up 2017-002, \$Monto 960.000**
8. **Investigador Participante del subsidio** “Desarrollo de herramientas de simulación computacional en biomoléculas y aplicación a fenómenos de alosterismo, reactividad química y transferencia electrónica en metaloproteínas” **PIP 2015-2017 (Resol D.111/16, Ref 112201 501003 03CO) \$ 450.000,00**
9. **Director del subsidio:** Estudio de los efectos fisio y farmacológicos del HNO sobre la función plaquetaria. Aportes de la biosíntesis endógena y nuevos donores de nitroxilo, **UBACyT 2015 (20020150100023BA), Monto \$105.000**
10. **Investigador Participante del subsidio:** “De la investigación básica al laboratorio clínico: Implementación de un método rápido y de bajo costo para el diagnóstico de la tuberculosis” **PID-Clínico 2015-0015, período 2016-2018 Monto: \$1.586.000.-)**
11. **Investigador Participante del subsidio** “Sensor Portátil de Nitroxilo, un avance en la prevención de infartos e isquemias” **PICT-2015-3854 Monto \$ 600.000**
12. **Director del subsidio:** Desarrollo y aplicación de tecnologías de Computación de Alta Performance en simulación de Sistemas Moleculares de Interés Biológico **RAICES-Siembra 2014-2015, Monto 120.000\$,**
13. **Director del subsidio:** Búsqueda de nuevos fármacos antituberculinicos en condiciones de estrés nitro/oxidativo, un enfoque dialéctico teórico experimental **PICTO-2012-0057, Monto \$ 688.480**
14. **Co-Director del subsidio:** “Determinantes Moleculares de la Interacción droga-receptor: desarrollo metodológico y aplicaciones en Galectinas, Oxigenasas Hemicas y MAPKs”. UBACyT, convocatoria **2012-2015 Monto. \$102.000**
15. **Director del subsidio:** “Determinantes Moleculares de la Interacción droga-receptor: desarrollo metodológico y aplicaciones en Galectinas, Oxigenasas Hemicas y MAPKs”. **PIP 112 201101 00850, convocatoria 2012-2014 Monto. \$300.000**
16. **Investigador participante del subsidio** “Centro de Bioinformática de Argentina” **PPL-2011-/0006 Area Bioinformatica. Monto \$7.978.700**
17. **Director del subsidio:** Bases moleculares del alostersimo y cambios conformacionales en hemoproteínas **PICT-2010-0416. Categoría Grupos en Formación. Monto: \$118.000**
18. **Director del subsidio:** Búsqueda de Nuevos Fármacos Antituberculinicos en la fase de stress: un enfoque bioinformático. **SUBSIDIO FUNDACIÓN BUNGE Y BORN PARA INVESTIGACIÓN SOBRE ENFERMEDADES INFECCIOSAS 2011-2012 Monto. \$120.000**

19. **Investigador participante del subsidio** Atacando los mecanismos de defensa del stress nitro/oxidativo del bacilo de la tuberculosis, un enfoque bioinformático. **PICT-2010-2805** Categoría Cooperación Internacional, Grupos de Trabajo área Genómica. Director: A Turjanski. Monto: \$300.000
20. **Director del subsidio:** Estudio de las bases estructurales y mecanísticas de la nitración de Tirosinas pato fisiológicamente relevantes combinando enfoques de simulación computacional y experimentales. Programación **UBACyT 2010/2012**. Categoría Grupos en Formación. Monto: \$24.000
21. **Director del subsidio:** Efecto del Campo Eléctrico sobre la Estructura y Función del Citocromo **PICT-2007-01650**. Categoría Jóvenes. Monto: \$30.000
22. **Investigador participante del subsidio:** Simulación computacional de la relación estructura-función en metaloproteínas. **CONICET PIP 12-200801-01207**, 2009-2011. Monto: \$300.000
23. **Director del subsidio:** Efecto del campo eléctrico sobre la estructura y función de proteínas de la cadena respiratoria. Programación **UBACyT 2008/2010** otorgado por resolución Nro 537/08. Categoría Investigadores Jóvenes. Monto: \$12.000
24. **Investigador participante del subsidio:** NO-Stress: Unravelling the molecular mechanism of nitrosative stress resistance in tuberculosis SEVENTH FRAMEWORK PROGRAMME (**FP07**) of THE EUROPEAN UNION. THEME HEALTH-2007-2.3.2-12. Monto: Euros 80.000

## FORMACION DE RECURSOS HUMANOS:

### Dirección de Investigadores

1. Director en la CIC del Dr Carlos Pablo Modenutti, Investigador Asistente del CONICET, esperando el alta desde su propuesta en diciembre 2021
2. Director en la CIC de la Dra Belen Almeyda, Investigadora Asistente del CONICET, esperando el alta desde su propuesta en diciembre 2021
3. Director en la CIC del Dr Juan Pablo Bustamante, Investigador Asistente del CONICET desde Abril 2019
4. Director en la CIC del Dr Federico Issoglio, Investigador Asistente del CONICET desde Marzo 2018
5. Co-Director en la CIC del Dr Ariel Berenstein, Investigador Asistente del CONICET desde Marzo 2017
6. Co-Director en la CIC de la Dra Luciana Capece, Investigadora Adjunta del CONICET desde Mayo 2013
7. Director en la CIC del Dr. Mariano Prado Acosta, desde Marzo 2014

### Tesis/Becas Doctorales Finalizadas

#### Tesis Doctorales

1. Director de Tesis Doctoral de la Lic Guadalupe Buda, Fecha de Defensa 2023.
2. Director de Beca Conicet y Tesis Doctoral del Lic Sebastián Vishnopolka, Fecha de Defensa 2022.
3. Director de Beca Conicet y Tesis Doctoral del Lic Juan Blanco, Fecha de defensa Abril 2022.
4. Director de Tesis Doctoral del Lic German Biagioli, Fecha de defensa Diciembre 2021.
5. Director de Beca Conicet y Tesis Doctoral de la Lic Jordana Galizia, Fecha de defensa junio 2020.
6. Director de Beca Conicet tipo II y Tesis Doctoral del Leandro Radusky Fecha de Defensa, Diciembre 2017.
7. Director de Beca de Conicet y Tesis Doctoral de La lic Lucia Alvarez Fecha de Defensa, Diciembre 2017.
8. Director de Beca de Conicet tipo I y Tesis Doctoral de La lic Claudia Ramirez Fecha de Defensa Diciembre 2016.
9. Director de Beca de Conicet y Tesis Doctoral de La lic Victoria Dumas, Fecha de Defensa Junio 2016 .
10. Director de la Tesis Doctoral y Co-director Beca Conicet Tipo I y II del Dr. Lucas DeFelipe, Fecha de Defensa, Diciembre 2015.
11. Co-Director de la tesis Doctoral y C-director Beca Conicet tipo II Dr Carlos Modenutti, fecha de defensa Noviembre 2015
12. Director y co-director de la Tesis Doctoral y Co-director de la Beca Conicet tipo I y II del Dr Sebastian Suarez, Fecha de Defensa, Marzo 2015.

13. Director de la Tesis Doctoral y Beca Conicet Tipo I y II Dr Diego Fernando Gauto, Fecha de Defensa Diciembre 2013
14. Co-Director de la de la Tesis Doctoral y de la Beca de Conicet tipo II del Dr. A. A. Petruk Fecha de Defensa: Diciembre 2011
15. Director Asistente de la Tesis Doctoral y Co-Director la Beca de Conicet tipo II del Lic. L. Boechi. Fecha de Defensa: Abril 2011
16. Director Asistente de la Tesis Doctoral y Co-director de la Beca de Conicet tipo II de la Lic. L. Capece. Fecha de Defensa: Diciembre 2010

### **Tesis de Licenciatura-Trabajos Finales de Carrera**

1. Director de la tesis de Licenciatura en Cs Biológicas (FCEN-UBA) de Guadalupe Buda. (Diciembre 2017)
2. Director de la tesis de Licenciatura en Cs Biológicas (FCEN-UBA) de Mariano Martín. (Diciembre 2015)
3. Director de la tesis de Licenciatura en Cs Biológicas (FCEN-UBA) de Jordana Galizia. (Diciembre 2014)
4. Director de la tesis de Licenciatura en Cs Biológicas (FCEN-UBA) de Juan Blanco. (Junio 2014)
5. Director de la tesis de Licenciatura en Física y Beca de estudiante de Claudia Lilian Ramirez (Universidad Nacional del Nor-Este, Marzo 2012)
6. Director de la tesis de Licenciatura en Cs Biológicas (FCEN-UBA) de Dardo Ferreiro. (Mayo 2012)
7. Director de la Materia Laboratorio de Química Inorgánica Analítica y Química Física (FCEN-UBA) de Lucia Alvarez (2do cuatrimestre del 2011, Nota Final 10)
8. Director de la Materia Laboratorio de Química Inorgánica Analítica y Química Física (FCEN-UBA) de Matias Molnar (2do cuatrimestre del 2011, Nota Final 9)
9. Director de la Materia Laboratorio de Química Inorgánica Analítica y Química Física (FCEN-UBA) de Diego F. Gauto (2do cuatrimestre del 2007, Nota Final 9)

**Nota:** En la FCEN la Licenciatura en Cs Químicas no posee tesis de licenciatura, en su lugar es optativo rendir la materia "Laboratorio de Química", cuya modalidad es equivalente a una tesis de licenciatura.

### **Becas Posdoctorales En Curso/Finalizadas**

1. Director beca pos-doctoral CONICET Camila Clemente 2021-2023
2. Director beca pos-doctoral CONICET Salvador Drusin 2018-2020
3. Director beca pos-doctoral CONICET Florencia Mercogliano 2018-2020
4. Director beca pos-doctoral CONICET Maria Andrea Camilletti 2018-2020
5. Director beca pos-doctoral CONICET Juan Pablo Bustamante 2016-2017
6. Director de beca pos-doctoral de CONICET Martin Dodes Traian 2015-2016
7. Director beca pos-doctoral de CONICET Carlos Modenutti 2016-2017
8. Director beca pos-doctoral NSF(USA) Mehrnoossh Arrar 2014-2015
9. Director beca pos-doctoral CONICET de Ariel Petruk 2012-2013

### **Becas/Tesis en Curso**

1. Director de Beca Conicet y Tesis Doctoral del Lic Justo Olmos Comienzo de la Beca Abril 2023
2. Director de Beca Agencia y Tesis Doctoral del Lic Juan Manuel Prieto Comienzo de la Beca Noviembre 2020.
3. Director de Beca Conicet y Tesis Doctoral del Lic Claudio Schuster Comienzo de la Beca Abril 2020
4. Director de Beca Conicet y Tesis Doctoral del Lic Franco Gino Brunello Comienzo de la Beca Abril 2019

### **BECAS OBTENIDAS:**

**Beca de Doctorado** del CONICET 2004-2007, Director D. A. Estrin Codirector F. Doctorovich

**Beca de la DAAD de investigación para doctorandos y jóvenes científicos** para realizar una pasantía en el Max-Volmer-laboratoruim fur biophysikalische chemie de la universidad técnica de Berlín en colaboración con los profesores P. Hildebrandt y DH Murgida. Para realizar experimentos de espectroscopía Raman. De Agosto - Noviembre del 2003

**Beca de investigación categoría estímulo UBA** dictada por el consejo superior el 18/4/2001

Para el trabajo en Reactividad química de hemoproteínas bajo la dirección de D A. Estrin

**Beca "IN LIBRIS CARPE ROSAM"** en Ciencias biológicas. Otorgada el 29 de noviembre de 2000 por la **ACADEMIA NACIONAL DE CIENCIAS EXACTAS, FÍSICAS Y NATURALES.**

## ANTECEDENTES PROFESIONALES

**Patentes:** *HNO Biosensor*, Solicitud de patente internacional PCT/IB2018/060614, Fecha de presentación: 26 de diciembre de 2018, Solicitantes: Universidad de Buenos Aires (UBA), Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET). Inventores: Doctorovich, F.; Martí, M.; Suárez, S.; Battaglini, F.

**Director Orden de Asistencia Técnica (OAT)** sobre “Análisis de datos y traducción de contenido de variantes genómicas humanas asociadas al riesgo de enfermedades derivadas de “Estudios de Asociación Genómica (GWAS)” para la empresa 23peers SA. Año 2019, Monto \$100.000

**Director del STAN 2351** de Consultoría Bioinformática para el Instituto Nacional de la Semilla, año 2018, Monto \$80.000

**Director del STAN 2351** de servicios bioinformáticos para la empresa Phylumtech, año 2016, Monto \$55.000

**Director del STAN 2351** de servicios bioinformáticos para el Hospital Garrahan, año 2015, Monto \$50.000

**Investigador Participante** en la realización del Convenio-Proyecto sobre “Detection of HNO liberated by prodrugs” con la empresa Cardioxyl (USA) – CONICET (Monto: USD 33000, 9-2014 a 8-2015).

**Investigador Participante** en la realización del Convenio-Proyecto sobre “Proyecto Plataforma de cálculo basada en tecnología reconfigurable para bioinformática: Desarrollo del Bothware” con la empresa Bife, **Años 2012-2013**, Monto \$45.000

**Investigador Participante** en la realización de una Orden de Asistencia Técnica (OAT) sobre “Evaluación Pliegos Para la Confección del Sistema Nacional de Huellas Genéticas” para la Fundación Sadosky, **Año 2013**, Monto \$10.000

**Investigador Participante** en la realización de una Orden de Asistencia Técnica (OAT) sobre “Armado y puesta a punto de una base de datos genómica de *Mycobacterium tuberculosis*” para la empresa **FluxIT**. **Año 2012**, Monto \$55.000

**Investigador Participante** del subsidio “Búsqueda, caracterización y evaluación del potencial biotecnológico de enzimas activas a bajas temperaturas provenientes de organismos antárticos” **PID 2010**. Instituciones participantes: Biosidus, Leloir, FCEyN, e Instituto Antártico. Monto \$2.200.000

**Investigador Participante** en la realización de una Orden de Asistencia Técnica (OAT) sobre “análisis preliminar y presentación de la base de datos para el análisis Bioinformático del Genoma de *Bizonia Argentinensis*” para la empresa **Biosidus**. Año 2010, Monto \$3.000

### Evaluador de los Subsidios/Ingresos a Carrera:

1. Evaluador de Subsidios PICT 2017
2. Evaluador de Subsidios PICT 2016
3. Evaluador Ingresos e informes de la CIC año 2016
4. Evaluador Subsidios PICT 2015 categoría grupo consolidado
5. Evaluador Ingresos y promociones de la CIC año 2015
6. Evaluador de Subsidios PIP Año 2014
7. Evaluador de Informes y Promociones del CONICET, convocatoria 2012 (Marzo-Abril 2013)
8. Evaluador Subsidios PICT 2012 Categorías Joven, Grupos en Formación y Grupos Consolidados
9. Evaluador de Ingresos a la Carrera del Investigador del CONICET, convocatoria 2011 (Mayo-Junio 2012)
10. Evaluador de Subsidio del FONDECYT-Chile (Octubre 2011)
11. Evaluador PICT 2011. Categoría Joven y Categoría Grupo Consolidado (Agosto 2011)
12. Evaluador Subsidios CONICET PIP 2011 (Mayo 2011)

13. Par Evaluador para el Ingreso a la Carrera del Investigador del CONICET, convocatoria 2010 (Agosto 2011)
14. Evaluador subsidio PICT Bicentenario categorías Jóvenes, PRH y de Grupos Consolidados Mayo- Junio 2010
15. Evaluador de subsidios del Fondo Profesor Clemente Estable de Investigación Científica y Tecnológica-2009, de la Agencia Nacional de Investigación e Innovación (ANII), Uruguay.
16. Evaluador PICT 2008. Categoría Joven (Septiembre 2009)

#### **Jurado de tesis:**

1. Jurado de Tesis Dcotoral de la FCEN Sr Ivana Gisele Molina Diciembre 2018
2. Jurado de Tesis Dcotoral de la UNQ Sr Marcia Hasenhauer Marzo 2018
3. Jurado de Tesis Dcotoral de la UNQ Sr Pablo Alcaín Junio 2017
4. Jurado de Tesis Dcotoral de la UNQ Sr Alexander Monzon Diciembre 2017
5. Jurado de Tesis Dcotoral de la UNQ Sr Fernando Baidanoff Diciembre 2017
6. Jurado de Tesis Dcotoral de la UNR Sr Bernardo Bazet Lyonnet Marzo 2015
7. Jurado de Tesis de Licenciatura en Cs Biologicas Srta Brenda Gutzovsky FCEN UBA Mar 2015
8. Jurado de Tesis de Licenciatura en Cs Biologicas Sr Joaquín Miguel Pellegrini FCEN UBA Dec 2014
9. Jurado de Tesis Dcotoral de la UnacSan Luis Sr Bernardo Adriana Garro Agosto 2013
10. Jurado de Tesis de Licenciatura en Cs Biologicas Sr Benjamin Basanta FCEN UBA Nov 2012
11. Jurado de Tesis de Licenciatura en Cs Biologicas Srta Estefania Urdaniz FCEN UBA Mar 2013
12. Jurado de Tesis Dcotoral del a UBA Sr Dario Fernadez Porto FCEN UBA Mar 2013

#### **Jurado del concursos:**

1. **Jurado del concurso** con el fin de proveer cargos de Ayudante de primera en el CEFIEC FCEN. Mayo 2016.
2. **Jurado del concurso** con el fin de proveer cargos de Jefe de Trabajos Practicos del Depto. de Química Biológica de la FCEN. Junio 2015
3. **Jurado del concurso** con el fin de proveer cargos de Jefe de Trabajos Practicos del Depto. de Fisiología y Biología Molecular de la FCEN. Noviembre 2011
4. **Jurado del concurso** con el fin de proveer cargos de Ayudante de 2da del Depto. Qca. Biologica de la FCEN. Marzo 2008
5. **Jurado del concurso** con el fin de proveer cargos de Ayudante de 2da del Depto. Qca. Inorg. Analítica y Química Física de la FCEN. Diciembre 2006

#### **Revisión de Artículos Científicos:**

Usualmente reviso articulos para las siguientes revistas:

1. Nature Communications
2. Nucleic Acid Research
3. Tuberculosis
4. Bioinformatics
5. Journal of Inorganic Biochemistry
6. Biophysical Journal
7. Journal of the American Chemical Society
8. Journal of Physical Chemistry
9. Journal of Chemical Information and Modelling
10. Biochem et Biophys Acta (BBA)
11. Diversas de las revistas de Frontiers.

#### **Otros Antecedentes:**

Desde 2022 soy miembro del Editorial Advisory Board de Journal of Chemical Informatoin and Modelling de la American Chemical Society <https://pubs.acs.org/page/jcis8/editors.html>

Premio Houssay 2018 area ciencias Biológicas (Molecular, Organismos y Sistemas) y Bioquímica

Premio CEDIQUIFA "Premios Cientificos en Tecnologías Genómicas de Nueva generación y Medicina de Precisión, Año 2017.

Premio Ranwel Caputo de la Academia Nacional de Ciencias año 2017

Premio Estímulo "Academia Nacional de Ciencias Exactas, Físicas y Naturales Año 2013" Sección de Ciencias Químicas, de la Tierra y Ciencias Biológicas "Pedro J. Aymonino" en Ciencias Químicas

**Premio Tr35** Argentina-Uruguay, entregado por la revista *Technology Review* en español editada por el MIT Agosto 2012

**Miembro Fundador** y del Consejo actual de la Asociación Argentina de Bioinformática y Biología Computacional, A<sup>2</sup>B<sup>2</sup>C Noviembre 2009.

#### **CARGOS DESEMPEÑADOS EN LA ADMINISTRACIÓN PÚBLICA:**

1. **Secretario de Posgrado FCEN-UBA desde Agosto 2023-**
2. Director del departamento de Química Biológica período 2016-2020
3. Miembro Suplente del CODEP del Dto Química Biológica por el Claustro de Profesores 2012-2013
4. Miembro de la Comisión ad-hoc, para la provisión de cargos de profesores, del CD de la FCEN años 2010 y 2011
5. Miembro del Consejo Directivo del INQUIMAE años 2010-2011
6. Miembro con autorización para asistir a las comisiones del CD de la FCEyN UBA, y firmar los despachos de las mismas como representantes de la mayoría del Claustro de Graduados. (Abril 2004 – Abril 2012)



.....  
**Marcelo A. Marti**