

CURRICULUM VITÆ

DATOS PERSONALES

Identificación: VILA, Alejandro José.

Dirección residencial: Cafferata 925 - 2000 ROSARIO

Dirección laboral: Instituto de Biología Molecular y Celular de Rosario (IBR), Rosario, Ocampo y Esmeralda, Predio CONICET Rosario, 2000 ROSARIO, Argentina

FORMACIÓN

FORMACIÓN ACADÉMICA

- Doctor en Química, Facultad de Ciencias Bioquímicas y Farmacéuticas (FCByF), Universidad Nacional de Rosario (UNR), 1990. **Título de Tesis:** 4a-Metil Octahidrofenantrenos. Análisis espectroscópico y su utilización en la síntesis de productos naturales. **Director:** Prof. Manuel González Sierra. **Lugar de trabajo:** Instituto de Química Orgánica de Síntesis (IQUIOS), Facultad de Ciencias Bioquímicas y Farmacéuticas, UNR. **Calificación:** Sobresaliente.
- Licenciado en Química Industrial, FCQel, 1986.
- Químico Analista Industrial, Facultad Católica de Química e Ingeniería "Fray Roger Bacon" (FCQel), Universidad Católica Argentina (UCA), 1984.

CARGOS ACTUALES

- Investigador Superior (CONICET). Lugar de trabajo: Instituto de Biología Molecular y Celular de Rosario (IBR-CONICET-UNR)
- Profesor Titular de Biofísica, Facultad de Ciencias Bioquímicas y Farmacéuticas, Universidad Nacional de Rosario.
- Director Académico, Área Biofísica, Departamento de Química Biológica, FCByF, UNR.
- Director, Plataforma Argentina de Biología Estructural y Metabólica (PLABEM).
- Director, Instituto de Biología Molecular y Celular de Rosario (IBR-CONICET-UNR).
- Director Científico, Aceleradora de proyectos Biotecnológicos *Bio.r* (CONICET).

ANTECEDENTES EN INVESTIGACIÓN Y DOCENCIA

DOCENCIA

- Ayudante de primera categoría, Dedicación Simple, Área Inorgánica, FCByF, UNR, 1986.
- Jefe de Trabajos Prácticos, Dedicación Simple, Área Inorgánica, FCByF, UNR, 1987-92.
- Jefe de Trabajos Prácticos, Dedicación Semiexclusiva, Catedra de Biofísica, Dto. Química Biológica, FCByF, UNR, 1993.
- Profesor Adjunto, Dedicación Simple, Área Biofísica, Dto. Química Biológica, FCByF, UNR, 1993-99.
- Profesor Asociado, Dedicación Simple, Área Biofísica, Dto. Química Biológica, FCByF, UNR, 1999-2016.
- Profesor Titular, Dedicación Simple, Área Biofísica, Dto. Química Biológica, FCByF, UNR, 2016-.
- Profesor Responsable de la materia y curso de posgrado “Espectroscopía de Biomoléculas”, FCByF, UNR, desde 1993.
- Profesor Responsable de la materia “Biofísica”, FCByF, UNR, desde 2015.
- Director académico, Área Biofísica, Departamento de Química Biológica, FCByF, UNR, desde 2015.
- Profesor invitado, 3rd Latin American NMR School, Bogotá, Colombia (2012).
- Organizador del Curso Internacional EMBO “Structure and dynamics of biomolecules by NMR spectroscopy”, Rosario, Argentina, 2009.
- Organizador del Curso Práctico de RMN: “Estrategias de asignación de proteínas en solución mediante espectroscopía de Resonancia Magnética Nuclear” (RMN), Rosario, Argentina, 2007.
- Director del curso: “Understanding Pulse Sequences in Modern Protein NMR”, Rosario, Argentina, 2006.
- Director, “International Course of Applications of Magnetic Resonance to Biological Systems”, setiembre de 1997 (Curso satélite del Congreso Iberoamericano de Biofísica). Co-organizado con la Facultad de Farmacia y Bioquímica (UBA).
- Investigador Visitante, Department of Chemistry and Chemical Engineering, California Institute of Technology, Pasadena, USA (1996).
- Profesor invitado, Departamento de Química Inorgánica, Universidad de Valencia, España (1998).
- Profesor invitado, International School for Advanced Studies (SISSA), Trieste, Italia (2000).
- Profesor del Programa de Actualización Académica para Profesores de Profesorado en Química, Santa Fe, Ministerio de Cultura y Educación de la Nación, concurso No. 150/97.
- Docente invitado de cursos de posgrados acreditados en UNSAM, UNC, UNT, UNL y UBA.

INVESTIGACIÓN

BECAS

- Beca de Iniciación, CONICET, 1986-88. **Director:** Prof. Manuel González Sierra. **Lugar de trabajo:** Instituto de Química Orgánica de Síntesis (CONICET-UNR). **Tema:** Estudio sobre las transformaciones del ácido 7- α -Acetoxi-Harwickiico y sus aplicaciones en la síntesis de productos naturales relacionados.
- Beca de Perfeccionamiento, CONICET, 1988-91. **Director:** Prof. Manuel González Sierra. **Lugar de trabajo:** Instituto de Química Orgánica de Síntesis (CONICET-UNR). **Tema:** Estudio sobre la utilización de los 4a-Metil Octahidrofenantrenos regio selectivamente sustituidos en la síntesis de productos naturales.
- Beca postdoctoral, International Centre for Genetic Engineering and Biotechnology (ICGEB), United Nations for the Industrial Development Organization (UNIDO), 1991-93. **Lugar de trabajo:** Departamento de Química, Universidad de Florencia, Italia. **Director:** Prof. Ivano

Bertini. **Tema:** Espectroscopía de Resonancia Magnética Nuclear de Macromoléculas Biológicas.

- Beca postdoctoral (suplemento), Fundación Antorchas, 1991.
- Beca de Investigador Formado (sin director), CONICET, 1993-95. **Lugar de trabajo:** Cátedra de Biofísica, Dto. Química Biológica, Facultad de Ciencias Bioquímicas y Farmacéuticas, UNR. **Tema:** Estudios espectroscópicos de la enzima anhidrasa carbónica por sustitución metálica.
- ACS Travel Fellowship, 1995.
- IUPAB Travel Fellowship, International Union for Pure and Applied Biophysics, 1996.

CARRERA DE INVESTIGADOR - CONICET

- Investigador Adjunto (sin director), CONICET, 1995-2000.
- Investigador Independiente, CONICET, 2000-2005.
- Investigador Principal, CONICET, 2006-2013.
- Investigador Superior, CONICET, 2013-.

CARGOS EN GESTIÓN INSTITUCIONAL

CARGOS EN ORGANISMOS CIENTÍFICO-TECNOLÓGICOS

- Director concursado, Instituto de Biología Molecular y Celular de Rosario (IBR, CONICET-UNR) 2015-2019.
- Director concursado, Instituto de Biología Molecular y Celular de Rosario (IBR, CONICET-UNR) 2011-2015.
- Director Científico, Aceleradora de proyectos Biotecnológicos *Bio.r* (CONICET), 2016-.
- Director de la Plataforma de Biología Estructural y Metabolómica (PLABEM), 2014-.
- Coordinador General, CeBEM (Centro de Biología Estructural del MERCOSUR) 2011-2014.
- Miembro del Consejo Directivo del Instituto de Biología Molecular y Celular de Rosario (IBR), en distintos períodos, 2002-2004, 2006-2008, 2009-2011.
- Secretario, Fundación IBR, 2008-2010.
- Vice-presidente, Fundación IBR, 2011-.
- Miembro del Consejo Académico de la Escuela de Biotecnología, 2006-2011.

CATEGORIZACIÓN DEL PROGRAMA DE INCENTIVOS

- Beneficiario del Programa de Incentivos para Docentes-Investigadores, Ministerio de Educación y Cultura, Categoría Equivalente de Investigación: B (1994-98), II (1999-2004) y I (2005).

PREMIOS Y DISTINCIONES

- Premio Estímulo a la Reinserción de Jóvenes Científicos al Sistema Científico-Técnico Argentino “Dr. Eduardo de Robertis”, Secretaría de Ciencia y Técnica, Presidencia de la Nación, 1994.
- Premio “Ernesto E. Galloni” en Fisicoquímica Experimental, Academia Nacional de Ciencias Exactas, Físicas y Naturales, 1995.
- Premio “Ranwell Caputto” en Ciencias Químicas, Academia Nacional de Ciencias, Córdoba, 2000.
- International Research Scholar, Howard Hughes Medical Institute, 2002-2006.
- Premio “Rafael Labriola”, Asociación Química Argentina, 2004.
- International Research Scholar, Howard Hughes Medical Institute, 2007-2011.
- Profesor Invitado, Programa ““Studiosi Stranieri di Chiara Fama”, Università degli Studi di Firenze, Italia. 2008.
- José Gómez Ibáñez Lecturer, Departamento de Química, Wesleyan University, 2008.
- Premio “María Cristina Giordano” a la trayectoria, Asociación Argentina de Investigación en Fisicoquímica y Química Inorgánica, 2009.
- Fellow, John Simon Guggenheim Memorial Foundation, 2009.
- Diploma al Mérito en Bioquímica y Biología Molecular, Fundación Konex, 2013.
- Investigador Distinguido de la Ciudad, Concejo Deliberante de Rosario, 2013.
- Premio “E.P.Abraham”, por las contribuciones al estudio de las beta-lactamasas, Beta-lactamase group, interscience conference on antimicrobial agents and chemotherapy (ICAAC), Washington DC, 2014.
- Ivano Bertini Award, for scientific achievements in copper research with emphasis on biological, biochemical and chemical mechanisms, International Copper Meeting, Sorrento (Italia), 2016.
- Académico Correspondiente, Academia Nacional de Farmacia y Bioquímica, desde 2017.
- Académico, Academia de Ciencias de América Latina, desde 2017.

PARTICIPACIÓN EN COMITÉS EDITORIALES DE REVISTAS

- Miembro del Editorial Advisory Board, *Journal of Biological Inorganic Chemistry*, 1998-2001.
- Miembro del Editorial Advisory Board, *European Journal of Inorganic Chemistry*, 2000-2006.
- Miembro del Editorial Board, *Journal of Inorganic Biochemistry*, 2003-2010.
- Miembro del Editorial Board, *Accounts of Chemical Research*, 2006- 2015.

FORMACIÓN DE RECURSOS HUMANOS

BECARIOS

1. Dr. Claudio Fernández, Beca Postdoctoral (CONICET), 1996-7. Actualmente es Investigador Principal de CONICET.
2. Dra. Julia A. Cricco, Beca de Iniciación (CONICET), 1997-99; Perfeccionamiento (1999-2002). Actualmente es Investigador Adjunto de CONICET.
3. Bioq. Adriana Ortolani (UNL), Beca FOMEC, 1998. Actualmente es docente en UNL.
4. Dr. Rodolfo M. Rasia, Beca de Formación de Posgrado (CONICET), 1999-2003. Actualmente es Investigador Independiente de CONICET.
5. Lic. Leticia Llarrull, Beca doctoral (ANPCyT), 2001-2003; Beca doctoral (CONICET), 2003-2007. Actualmente es Investigador Adjunto de CONICET.
6. Lic. Pablo Tomatis, Beca doctoral (Beca Carrillo-Oñativia /Financ. subsidio HHMI), 2001-2004; Beca de posgrado (CONICET), 2004-2008. Actualmente es Investigador Asistente de CONICET.
7. Lic. Valeria Campos Bermúdez, Beca doctoral (Financ. subsidio HHMI), 2002-2004; Beca de posgrado (CONICET), 2004-2008. Actualmente es Investigador Asistente de CONICET.
8. Dra. Claudia Blanco Rivero, Beca postdoctoral (Financ. subsidio HHMI), 2002-2004.
9. Dra. Mariana Tioni, Beca postdoctoral (CONICET), 2004-2006.
10. Lic. Javier González, Beca doctoral (ANPCyT), 2004-2008.
11. Lic. Luciano Abriata, Beca doctoral (ANPCyT), 2004-2007; Beca de Posgrado Tipo II (CONICET), 2008-.
12. Dra. Julia Cricco, Beca de reinserción (CONICET), 2005.
13. Dra. Gabriela Ledesma, Beca postdoctoral (CONICET), 2006-2008. Actualmente es Investigador Asistente de CONICET.
14. Lic. Ma. Natalia Lisa, Beca de Formación de posgrado (CONICET), 2007-.2010
15. Lic. Lisandro González, Beca de Formación de posgrado (CONICET), 2010-2011
16. Lic. Ma. Eugenia Zaballa, Beca de Formación de posgrado (CONICET), 2008-.2010-2011-2012.
17. Dr. Pablo Tomatis, Beca postdoctoral (CONICET), 2008-2010.
18. Lic. Ma. Rocío Meini, Beca de Formación de posgrado (CONICET), 2009-2011
19. Dra. Jorgelina Morán Barrio, Beca postdoctoral (CONICET), 2009-2011.
20. Lic. Mariano Gonzalez, Beca doctoral (Financ. subsidio HHMI)2009-2011
21. Lic. Marcos Morgada, Beca doctoral (ANPCyT), 2011-2013
22. Lic. Andrés Espinoza Cara, Beca de formación de posgrado (CONICET), 2011-2014
23. Lic. Antonela Palacios, Beca de formación de posgrado (CONICET), 2013-2017.
24. Lic. Alcides Leguto, Beca de formación de posgrado (CONICET), 2013-2017.
25. Lic. Guillermo Bahr, Beca de formación de posgrado (CONICET), 2013-2017.
26. Dr. Lisandro Gonzalez, Beca postdoctoral (CONICET), 2014-2016.
27. Lic. María Eugenia Llasses, Beca doctoral (ANPCyT), 2014-2017.
28. Lic. Estefanía Giannini, Beca doctoral (CONICET), 2015-2019.
29. Lic. Agustina Rossi, Beca doctoral (CONICET), 2016-2020.
30. Lic. Juliana Delmonti, Beca doctoral (CONICET), 2017-2021.
31. Dr. Marcos Morgada, Beca postdoctoral (CONICET), 2016-2018.
32. Dra. Carolina López, Beca posdoctoral (Finan. Subsidio NIH) 2017-2019.

DIRECCIÓN DE TESIS DE LICENCIATURA (FINALIZADAS)

1. Lic. Andrés Montefeltro, 1996. **Título:** "Estudio de la interacción de apo-Stellacianina con metales". **Calificación:** Sobresaliente.
2. Lic. Javier Girardini Brovelli, 1997. **Título:** "Estudios de la relación estructura-función en una metaloenzima con actividad β -lactamasa". **Calificación:** Sobresaliente.
3. Lic. Rodolfo M. Rasia, 1999. **Título:** "Regulación de la función del sitio activo de la enzima β -lactamasa II de *Bacillus cereus* por mutagénesis sitio-dirigida". **Calificación:** Sobresaliente.

4. Lic. Lautaro Diacovich, 2000. **Título:** "Clonado y sobre-expresión de una enzima superóxido dismutasa dependiente de níquel". **Calificación:** Sobresaliente.
5. Lic. Miguel Chames, 2002. **Título:** "Alteraciones en el sitio activo de una β -lactamasa metálica". **Calificación:** Sobresaliente.
6. Lic. Javier González, 2003. **Título:** "Construcción de metaloenzimas quiméricas mediante reingeniería del sitio activo de la metalo- β -lactamasa de *Bacillus cereus*". **Calificación:** Sobresaliente.
7. Lic. Luciano Abriata, 2004. **Título:** "Ingeniería de la red de puentes hidrógeno del sitio activo de enzima β -lactamasa II de *Bacillus cereus*". **Calificación:** Sobresaliente.
8. Lic. Lisandro González, 2006. **Título:** "Una mirada al sitio Zn² de la metalo- β -lactamasa de *Bacillus cereus*". **Calificación:** Sobresaliente.
9. Lic. María Eugenia Zaballa, 2008. **Título:** "Estudio de la interacción de metalo- β -lactamasas con posibles inhibidores mediante Resonancia Magnética Nuclear". **Calificación:** Sobresaliente.
10. María Fernanda Guindón, 2010. **Título:** "Estudio del rol estructural y funcional del residuo Met221 de la metalo- β -lactamasa GOB-18 de *Elizabethkingia meningoseptica*". **Calificación:** Sobresaliente.
11. María Florencia Emiliani, 2010. **Título:** "Ingeniería de un sitio de cobre sensible al pH en el centro Cu_A en Citocromo c Oxidasa". **Calificación:** Sobresaliente.
12. Andrés Espinoza Cara, 2011. **Título:** "Estudio del mecanismo de ensamblado del sitio Cu_A de Citocromo c Oxidasa". **Calificación:** Sobresaliente.
13. Alcides Leguto, 2013. **Título:** "Determinantes bioquímicos y estructurales de la proteína HCC2 de *Arabidopsis thaliana* en la homeostasis de cobre". **Calificación:** Sobresaliente.
14. Guillermo Bahr, 2013. **Título:** "Explorando el potencial evolutivo de la Metalo- β -Lactamasa VIM-2". **Calificación:** Sobresaliente.
15. Estefanía Giannini, 2014. **Título:** "Estudio de la función de residuos de segunda esfera de coordinación de la metalo- β -lactamasa NDM-1". **Calificación:** Sobresaliente.
16. Luisina Vitor-Horen, 2016. **Título:** "Estudio de la evolución natural de la Metalo- β -Lactamasa NDM-1". **Calificación:** Sobresaliente.

DIRECCIÓN DE TESIS DOCTORALES (FINALIZADAS)

1. Dra. Julia A. Cricco (2002). Doctor, Químicas y Farmacéuticas, Facultad de Ciencias Bioquímicas y Farmacéuticas (UNR). **Tema:** "Estudio del rol de un residuo de cisteína en la estructura y función de metalo- β -lactamasas". **Calificación:** Sobresaliente. Actualmente es Investigador Adjunto de CONICET y Profesor Adjunto en la UNR.
2. Dr. Matteo dal Peraro (2004). PhD, SISSA (Trieste). **Tema:** "Metallo- β -lactamasas: substrate binding and catalytic mechanism". **Calificación:** *Summa cum laudae*. Codirector de la tesis (Director: Dr. Paolo Carloni). Actualmente es Associate Profesor en la Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne.
3. Dr. Rodolfo M. Rasia (2004). Doctor, Facultad de Ciencias Bioquímicas y Farmacéuticas (UNR). **Tema:** "Estudio de la formación de un sitio binuclear en una metalo- β -lactamasa. Efectos del cambio de ligandos, metales y entorno proteico". **Calificación:** Sobresaliente. Premio a la Mejor Tesis en Biofísica (Sociedad Argentina de Biofísica) y Premio Ezio Emiliani a la Mejor Tesis en Biotecnología (Universidad Nacional de Litoral). Actualmente es Investigador Independiente de CONICET y Profesor Asociado en la UNR.
4. Dra. Leticia I. Llarrull (2007). Doctor en Ciencias Biológicas, Facultad de Ciencias Bioquímicas y Farmacéuticas (UNR). **Tema:** "Estudio del contenido de metal y del mecanismo catalítico de la metalo- β -lactamasa BclI de *Bacillus cereus*". **Calificación:** Sobresaliente. Premio a la Mejor Tesis en Biofísica (Sociedad Argentina de Biofísica). Actualmente es Investigador Adjunto de CONICET.
5. Dra. Valeria A. Campos Bermúdez (2008). Doctor en Ciencias Biológicas, Facultad de Ciencias Bioquímicas y Farmacéuticas (UNR). **Tema:** "Estudios de la actividad enzimática y

- evolución de proteínas con plegamiento metalo- β -lactamasa”. **Calificación:** Sobresaliente. Actualmente es Investigador Asistente de CONICET.
6. Dr. Pablo E. Tomatis (2008). Doctor en Ciencias Biológicas, Facultad de Ciencias Bioquímicas y Farmacéuticas (UNR). **Tema:** “Evolución molecular dirigida de metalo- β -lactamasas”. **Calificación:** Sobresaliente. Premio a la Mejor Tesis en Ciencias de la Salud (Secretaría de Ciencia, Tecnología e Innovación de la Provincia de Santa Fe). Actualmente es Investigador Asistente de CONICET.
 7. Lic. Javier M. González (2009). Doctor en Ciencias Biológicas, Facultad de Ciencias Bioquímicas y Farmacéuticas (UNR). **Tema:** “Estructura atómica y función del segundo sitio de unión a Zn(II) en la metalo- β -lactamasa de *Bacillus cereus*”. **Calificación:** Sobresaliente. Actualmente es Investigador Adjunto de CONICET (Univ. Nac. Santiago del Estero).
 8. Lic. Luciano Abriata (2010). Doctor en Química, Facultad de Ciencias Bioquímicas y Farmacéuticas (UNR). **Tema:** “Estudios espectroscópicos de sitios de cobre en proteínas de transferencia electrónica”. **Calificación:** Sobresaliente. Premio a la Mejor Tesis en Biofísica (Sociedad Argentina de Biofísica). Actualmente es becario postdoctoral en la Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne, Suiza.
 9. Lic. María Natalia Lisa (2010). Doctora en Ciencias Biológicas, Facultad de Ciencias Bioquímicas y Farmacéuticas (UNR). **Tema:** “Estudio estructural y funcional de la metalo- β -lactamasa GOB-18 de *Elizabethkingia meningoseptica*”. **Calificación:** Sobresaliente. Actualmente es becario postdoctoral en el Instituto Pasteur en París, Francia.
 10. Lic. Lisandro González (2012). Doctor en Ciencias Biológicas, Facultad de Ciencias Bioquímicas y Farmacéuticas (UNR). **Tema:** “Estudio del rol de metalo- β -lactamasas endógenas y adquiridas en la resistencia bacteriana contra antibióticos β -lactámicos”. **Calificación:** Sobresaliente. Actualmente es Investigador Asistente de CONICET.
 11. Lic. Ma. Eugenia Zaballa (2012). Doctora en Química, Facultad de Ciencias Bioquímicas y Farmacéuticas (UNR). **Tema:** “Resonancia magnética nuclear de sitios de cobre en proteínas”. **Calificación:** Sobresaliente. Actualmente es becario postdoctoral en la Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne, Suiza.
 12. Lic. Ma. Rocío Meini (2014). Doctora Ciencias Biológicas. Facultad de Ciencias Bioquímicas y Farmacéuticas (UNR). **Tema:** “Estudio del potencial evolutivo y la plasticidad estructural de enzimas β -lactamasas”. **Calificación:** Sobresaliente. Premio a la Mejor Tesis en Ciencias de la Salud (Secretaría de Ciencia, Tecnología e Innovación de la Provincia de Santa Fe). Actualmente es becario postdoctoral de CONICET.
 13. Lic. Mariano González (2016). Doctor en Ciencias Biológicas, Facultad de Ciencias Bioquímicas y Farmacéuticas (UNR). **Tema:** “Estudios de inhibición y flexibilidad en enzimas metalo-beta-lactamasas”. **Calificación:** Sobresaliente. Actualmente es becario postdoctoral de CONICET.
 14. Lic. Marcos Morgada, (2016). Doctor en Ciencias Biológicas, Facultad de Ciencias Bioquímicas y Farmacéuticas (UNR). **Tema:** “Estudio estructural y reconocimiento proteína-proteína de metalochaperonas mitocondriales”. **Calificación:** Sobresaliente. Actualmente es becario postdoctoral de CONICET.
 15. Lic. Antonela Palacios, tesis en curso, Facultad de Ciencias Bioquímicas y Farmacéuticas (UNR). **Tema:** “Diseño de inhibidores de Metalo- β -lactamasas en base a su mecanismo catalítico”. **Calificación:** Sobresaliente. Actualmente es becario postdoctoral de CONICET.

DIRECCIÓN DE TESIS DOCTORALES (EN CURSO)

16. Lic. Andrés Espinoza Cara, tesis en curso, Facultad de Ciencias Bioquímicas y Farmacéuticas (UNR). **Tema:** “Modulación de la estructura electrónica y movilidad de proteínas de cobre de transferencia electrónica mediante ingeniería de bucles”.
17. Lic. Guillermo Bahr, tesis en curso, Facultad de Ciencias Bioquímicas y Farmacéuticas (UNR). **Tema:** “Metallo- β -lactamasas como modelo de la influencia de la flexibilidad conformacional sobre la evolución de proteínas”.

18. Lic. Alcides Leguto, tesis en curso, Facultad de Ciencias Bioquímicas y Farmacéuticas (UNR).
Tema: "Rol de la flexibilidad de proteínas en su adaptabilidad funcional".
19. Lic. María Eugenia Llases, tesis en curso Facultad de Ciencias Bioquímicas y Farmacéuticas (UNR). **Tema:** "Estudio bioquímico y estructural de las proteínas mitocondriales HCC1 y HCC2 de *A.thaliana*".
20. Lic. Estefanía Giannini, tesis en curso Facultad de Ciencias Bioquímicas y Farmacéuticas (UNR). **Tema:** "Estudio bioquímico y structural de la metalo beta lactamsas NDM-1: residuos de segunda esfera e implicancias de su anclaje a membrana".
21. Lic. Agustina Rossi, tesis en curso Facultad de Ciencias Bioquímicas y Farmacéuticas (UNR).
Tema: "Papel de la flexibilidad conformacional en la aptitud de enzimas β -lactamasas".
22. Lic. Juliana Delmonti, tesis en curso Facultad de Ciencias Bioquímicas y Farmacéuticas (UNR). **Tema:** "Estudio de la evolución natural de la carbapenemasa NDM y su impacto clínico".

DIRECCIÓN DE INVESTIGADORES

- Director del Dr. Claudio Fernández, Investigador Asistente (CONICET), 1997-2002. Actualmente es Investigador Principal de CONICET.
- Director de la Dra. Julia Cricco, Investigador Asistente (CONICET), 2006-2012. Actualmente es Investigador Adjunto de CONICET.
- Director de la Dra. Mariana Tioni, Investigador Asistente (CONICET), 2006-2011.
- Director del Dr. Pablo E. Tomatis, Investigador Asistente (CONICET), 2010-.
- Director del Dr. Lisandro González, Investigador Asistente (CONICET), 2016-.

PRODUCCIÓN CIENTÍFICA

Todas las revistas son de circulación internacional y con referato (salvo se indique lo contrario). En este listado no se incluyen resúmenes de presentaciones a congresos. En total, estas publicaciones cuentan con más de 4300 citas, **h-index**: 39 (Google Scholar) (Abril 2018).

ARTÍCULOS ORIGINALES Y TRABAJOS DE REVISIÓN EN REVISTAS

123. A.R. Palacios, M.F. Mojica, E. Giannini, M.A. Taracila, C.R. Bethel, P.M. Alzari, L.H. Otero, S. Klinke, L.I. Llarrull, R.A. Bonomo and **A.J. Vila** "The Reaction Mechanism of Metallo- β -lactamases is Tuned by the Conformation of an Active Site Mobile Loop", enviado.
122. U. A. Zitare, J. Szuster, M.F. Scozozza, A.Espinoza-Cara, A.J.Leguto, M.N.Morgada, **A.J. Vila** and D.H. Murgida "The Role of Molecular Crowding in Long-Range Metalloprotein Electron Transfer: Dissection into Site- and Scaffold-Specific Contributions", enviado.
121. A. Espinoza-Cara, U.A. Zitare, D. Alvarez-Paggi, S. Klinke, L.H. Otero, D.H. Murgida and **A.J. Vila** "Biosynthesis of a bifunctional copper site in the cupredoxin fold", enviado.
120. L. J. González, C. Stival, J.L. Puzzolo, D.M. Moreno and **A.J.Vila** "Shaping substrate selectivity in a broad spectrum metallo- β -lactamase", *Antimicrobial Agents and Chemotherapy*, pii: AAC.02079-17 (2018).
119. G. Bahr, L. Vitor-Horen, C. Bethel, R.A. Bonomo, L.J. González and **A.J. Vila** "Clinical evolution of New Delhi Metallo-beta-lactamase (NDM) optimizes resistance under Zn(II) deprivation", *Antimicrobial Agents and Chemotherapy*, **61** e00716-17 (2017).
118. A. Timon-Lopez, E. Nyvltova, L.A. Abriata, **A.J. Vila**, J. Hosler and A. Barrientos "Mitochondrial Cytochrome c Oxidase Assembly: New Developments", *Sem. Cell. Dev. Biol.*, **17**, 30275-6 (2017).
117. D. Alvarez-Paggi, U.A. Zitare, J. Szuster, M. N. Morgada, A. J. Leguto, **A. J. Vila**, D. H. Murgida "Tuning of enthalpic/entropic parameters of a protein redox center through manipulation of the electronic partition function", *J. Am. Chem. Soc.*, 2017, **139**, 9803–9806 (2017).
- 116.M. Mojica, K. Papp-Wallace, M.Taracila, M. Barnes, J. Rutter, M. Jacobs, J. LiPuma, T.s Walsh, **A. J. Vila**, and R. Bonomo "Avibactam restores the susceptibility of aztreonam against clinical isolates of *Stenotrophomonas maltophilia*", *Antimicrobial Agents and Chemotherapy*, **61**, e00777-17 (2017).
115. M.N. Lisa, A.R. Palacios, M. Aitha, M. M. González, D.M.Moreno, M.W. Crowder, J. Spencer, D.L. Tierney, L.I. Llarrull and **A. J. Vila** "A General Reaction Mechanism for Mono- and Binuclear Metallo- β -lactamases", *Nature Communications*, doi: 10.1038/s41467-017-00601-9. (2017).
114. M. Roger, G. Sciarra, F. Biaso, E. Lojou, X. Wang, M. Bauzan, M.T. Giudici-Orticoni, **A.J. Vila** and M. Ilbert "Impact of copper ligand mutations on a cupredoxin with a green copper center" *Biochim. Biophys. Acta.* **1858**, 351-359 (2017).
113. S. H. Marshall, A.M. Hujer, L.J.Rojas , K.M. Papp-Wallace, R.M.Humphries, B.J. Spellberg , K. Hujer, E. Marshall, S.D. Rudin, F. Perez, B. Wilson, R. Wasserman, L. Chikowski, D. Paterson, **A.J. Vila**, D. van Duin, B. N. Kreiswirth, H. F. Chambers, V.G. Fowler, M. R. Jacobs, M. Pulse, W.J. Weiss and R.A. Bonomo "Can ceftazidime/avibactam and aztreonam overcome β -lactam resistance conferred by metallo- β -lactamases in Enterobacteriaceae?", *Antimicrobial Agents and Chemotherapy*, doi: 10.1128/AAC.02243-16 (2017).
112. C. Saiz, V. Villamil, M. M. González, M. A. Rossi, L. Martínez, L. Suescun, **A.J. Vila** and G. Mahler "Enantioselective synthesis of new oxazolidinylthiazolidines as enzyme inhibitors" *Tetrahedron: Asymmetry*, **28**, 110-117 (2017).
111. L.J. González, G. Bahr and A.J. Vila "Lipidated β -lactamases: from bench to bedside", *Future Microbiology*, **54**, 640–649 (2016). **Editorial**.
110. J. Morán-Barrio, M.N. Lisa, N. Larrieux, S.I.Drusin, A.M. Viale, D.M.Moreno, A. Buschiazzo A and **A.J.Vila*** "Crystal Structure of the Metallo- β -Lactamase GOB in the periplasmic di-Zinc

- form reveals an unusual metal site”, *Antimicrobial Agents and Chemotherapy*, **60**, 6013-22 (2016).
109. P.Hinchliffe, M.M. González, M. F. Mojica, J. M. González, V. Castillo, C. Saiz, M. Kosmopoulou, C. L. Tooke, L. I. Llarrull, G. Mahler, R. A. Bonomo, **A.J. Vila***, J. Spencer* “Cross-class metallo- β -lactamase inhibition by bisthiazolidines reveals multiple binding modes”, *Proc.Natl.Acad.Sci USA*, **111**, E3745-54 (2016). *Autores corresponsales.
108. M. M. González, L.A. Abriata, P.E. Tomatis and **A.J.Vila** “Optimization of Conformational Dynamics in an Epistatic Evolutionary Trajectory”, *Mol.Biol. Evol.*, **33**, 1768-76 (2016).
107. L.J. González, G. Bahr, T.G. Nakashige, E.M. Nolan, R.A. Bonomo and **A.J.Vila** “Membrane-anchoring stabilizes New Dehli carbapenemase NDM-1 upon zinc starvation and favors protein export into vesicles”, *Nature Chemical Biology*, **12**, 516-22 (2016).
106. F. Pasteran, L.J.González, E. Albornoz, G. Bahr, **A.J.Vila**, and A.Corso “Triton Hodge Test: an improved protocol of the Modified Hodge Test for enhanced detection of NDM and other carbapenemase producers”, *J. Clin. Microbiol.* **54**, 640-9 (2016).
105. M. R. Meini, L.I. Llarrull and **A. J. Vila** “Overcoming differences: the catalytic mechanism of metallo- β -lactamases”, *FEBS Letters*, **589**, 3419-32 (2015). *Review*.
104. M.N. Morgada, L.A. Abriata, C. Cefaro, K.Gajda, L. Banci and **A.J.Vila** “Loop recognition and copper-mediated disulfide reduction underpin metal site assembly of Cu_A in human cytochrome oxidase”, *Proc.Natl.Acad.Sci USA*, **112**, 11771-6 (2015).
103. U.Zitare, D.Álvarez-Paggi, M. N. Morgada, L.A. Abriata, **A.J.Vila** and D.H.Murgida “Reversible Switching of Redox Active Molecular Orbitals and Electron Transfer Pathways in CuA Sites”, *Angew.Chemie*, **54**, 9555-9 (2015).
102. M. M. González, M. Kosmopoulou, V. Castillo, P.Hinchliffe, J. Brem, C.J.Schofield, G. Mahler, R.A.Bonomo, L.I. Llarrull, J. Spencer and **A.J.Vila** “Bisthiazolidines: a substrate-mimicking scaffold as an inhibitor of the NDM-1 carbapenemase”, *ACS Infectious Diseases*, **1**, 544-554 (2015). Incluido en **Special Issue on Gram-Negative Resistance**.
101. M.F. Mojica, S.G.Mahler, C.R.Bethel, M.A. Taracila, M.Kosmopoulou, K.M.Papp-Wallace, L.I.Llarrull, B.Wilson, S.H.Marshall, C.J.Wallace, M.V.Villegas, M.E.Harris, A.J.Vila, J.Spencer, R.A. Bonomo “Exploring the Role of Residue 228 for Substrate and Inhibitor Recognition by VIM Metallo - β -Lactamases”, *Biochemistry*, **54**, 3183-96 (2015).
100. M.R. Meini, P.E. Tomatis, D.M.Weinreich and **A.J. Vila** “Quantitative Description of a Protein Fitness Landscape Based on Molecular Features”, *Mol.Biol.Evol.*, **32**, 1774-87 (2015).
99. L.A. Abriata, L.B. Pontel, **A.J. Vila**, M. Dal Peraro and F. C. Soncini “A dimerization interface mediated by functionally critical residues creates interfacial disulfide bonds and copper sites in CueP”, *J.Inorg.Biochem.*, **140**, 199-201 (2014).
98. F. Perez, A.M. Hujer, S.H. Marshall, A.J. Ray, P.N. Rather, N.Suwantarant, D. Dumford III, P. O’Shea, R.A. Salata, B.N. Kreiswirth, **A.J.Vila**, M.R. Jacobs and R.A. Bonomo “Extensively Drug Resistant (XDR) *Pseudomonas aeruginosa* Containing blaVIM-2 and Elements of Salmonella Genomic Island 2: A New Genetic Resistance Determinant in Northeast Ohio”, *Antimicrobial Agents and Chemotherapy*, **58**, 5929-35 (2014).
97. M.R. Meini, L.I. Llarrull and **A.J. Vila** “Evolution of Metallo- β -lactamases: trends revealed by natural diversity and in vitro evolution”, *Antibiotics*, **3**, 285-316 (2014). *Review*.
96. M.N.Morgada, L.A.Abriata, U.Zitare, D.Álvarez-Paggi, D.H.Murgida and **A. J.Vila** “Control of the electronic ground state on an electron transfer copper site by second-sphere perturbations”, *Angew.Chemie*, **10**, 6188-92 (2014).
95. L.A. Abriata, **A.J.Vila** and M. Dal Peraro “Molecular dynamics simulations of apocupredoxins: insights into the formation and stabilization of entatic copper sites”, *J.Biol.Inorg.Chem.*, **19**, 565-75 (2014).
94. P. Marchiaro, L. Brambilla, J. Moran-Barrio, S. Revale, F. Pasteran, **A.J. Vila**, A. Viale, and A. Limansky, "The complete nucleotide sequence of the carbapenem resistance-conferring conjugative plasmid pLD209 from a *Pseudomonas putida* clinical strain revealed a chimeric

design formed by modules derived from both environmental and clinical bacteria”, *Antimicrobial Agents and Chemotherapy*, **58**, 1816-21 (2014).

93. L. J. González, D.M. Moreno, R.A. Bonomo, **A.J. Vila** “Host-specific enzyme-substrate interactions in SPM-1 metallo- β -lactamase are modulated by second sphere residues”, *PLoS Pathogens*, doi: 10.1371/journal.ppat.1003817.a (2014).

92. L.A. Abriata, **A.J. Vila** “Redox-state sensing by hydrogen bonds in the Cu_A center of cytochrome *c* oxidase”, *J.Inorg.Biochem.*, **132**, 18-20 (2014).

91. M.R.Meini, L.J.González, **A.J. Vila** “Antibiotic resistance in zinc-deficient environments: Metallo-beta-lactamase activation in the periplasm”, *Future Microbiology*, **8**, 947-979 (2013). *Editorial*.

90. D. Alvarez-Paggi, L.A. Abriata, D.H.Murgida*, **A.J. Vila*** "Native Cu_A Redox Sites are Largely Resilient to pH Variations within Physiological Range", *J.Chem.Soc., Chem.Comm*, **49**, 5381-3 (2013). *Autores corresponsales.

89. L.A. Abriata, M.E. Zaballa, R.E. Berry, F. Yang, H. Zhang, F.A.Walker, **A.J. Vila**, “Electron Spin Density on the Axial His Ligand of High-Spin and Low-Spin Nitrophorin 2 Probed by Heteronuclear NMR Spectroscopy”, *Inorg Chem.*, **52**, 1285-95 (2013).

88. M.N.Lisa, J.Morán-Barrio, M.F.Guindón, **A.J.Vila**, "Probing the role of Met221 in the unusual metallo-lactamase GOB-18", *Inorg. Chem.*, **51**, 12419–12425 (2012).

87. L.A.Abriata, D.Álvarez-Paggi, G.N.Ledesma, N.J.Blackburn, **A.J.Vila*** and D.H.Murgida* “Alternative ground states enable pathway switching in biological electron transfer”, *Proc.Natl.Acad.Sci USA*, **109**, 17348-53 (2012). *Autores corresponsales

86. J.M.González, M.R.Meini, P.E.Tomatis, F.J.Medrano, J.A.Cricco and **A.J.Vila** “Metallo- β -lactamases withstand low Zn(II) conditions by tuning metal-ligand interactions”, *Nature Chemical Biology*, **8**, 698-700 (2012). **Highlighted in Faculty of 1000**.

85. M.E.Zaballa, L.A. Abriata, A.Donaire and **A.J.Vila** “Flexibility of the metal binding region in apo-cupredoxins” *Proc.Natl.Acad.Sci USA*, **109**, 9254-9 (2012). **Recommended in Faculty of 1000**.

84. K. Lancaster; M.E. Zaballa; S. Sproules; M. Sundararajan; S. DeBeer; J.H. Richards; **A.J. Vila**; F. Neese and H.B. Gray “Outer-Sphere Contributions to the Electronic Structure of Type Zero Copper Proteins”, *J.Am.Chem.Soc.*, **134**, 8241-53 (2012).

83. J. Sgrignani, M.Dal Peraro, P.Carloni, A.Magistrato, **A.J.Vila** and R.Pierattelli “An alternative structural model for the active site of mononuclear B1 metallo- β -lactamases”, *J.Computer-Aided Molecular Design*, **26**, 425-35 (2012).

82. R.M.Breece, L.I.Llarrull, M.F.Tioni, **A.J.Vila** and D.L. Tierney “X-ray absorption spectroscopy of metal site speciation in the metallo- β -lactamase BclI from *Bacillus cereus*”, *J. Inorg.Biochem.*, **111**, 82-6 (2012).

81. L.J. González and **A.J.Vila** “Carbapenem resistance in *Elizabethkingia meningoseptica* is mediated by metallo- β -lactamase BlaB”, *Antimicrobial Agents and Chemotherapy*, **56**, 1686 - 1692 (2012).

80. M.N. Lisa, J. Morán-Barrio, and **A.J.Vila** “In vivo impact of Met221 substitution in GOB metallo- β -lactamase”, *Antimicrobial Agents and Chemotherapy*, **56**, 1769-1773 (2012).

79. J.M.González, A.Buschiazzo and **A.J.Vila** “Evidence for adaptability in metal coordination geometry and active-site loops conformation among B1 metallo- β -lactamases”, *Biochemistry*, **49**, 7930–7938 (2010).

78. M.E.Zaballa, L.Ziegler, D.J. Kosman and **A.J.Vila** “NMR Study of the Exchange Coupling in the Trinuclear Cluster of the Multicopper Oxidase Fet3p”, *J.Am.Chem.Soc.*, **132**, 11191–11196 (2010).

77. V.A.Campos-Bermudez, J.M.González, D.L.Tierney and **A.J.Vila** “Spectroscopic Signature of a Ubiquitous Metal Binding Site in the Metallo- β -Lactamase Superfamily”, *J.Biol.Inorg.Chem.*, **15**, 1209-1218 (2010).

76. P.Marchiaro, A.M.Viale, V.Ballerini, G.Rossignol, A.J.Vila and A.S.Limansky "First report of a Tn402-like class 1 integron carrying blaVIM-2 in Pseudomonas putida from Argentina", *J.Infect. Dev. Ctries.*, **30**, 412-6 (2010).
75. M.A.Martinez, M.E.Zaballa, F.Schaeffer, M.Bellinzoni, D.Albanesi, G.E.Schujman, **A.J.Vila**, P.M.Alzari and D.de Mendoza "A Novel Role of Malonyl-ACP in Lipid Homeostasis", *Biochemistry*, **49**, 3161-7 (2010).
74. V.A.Campos-Bermudez, A.J.Costa-Filho and **A.J.Vila** "Metal-dependent inhibition of glyoxalase II: A possible mechanism to regulate the enzyme activity", *J. Inorg.Biochem.*, **104**, 726-731 (2010).
73. M.N. Lisa, L.Hemmingsen and **A.J.Vila** "Catalytic role of the metal ion in the metallo- β -lactamase GOB", *J. Biol.Chem.*, **285**, 4570-7 (2010).
72. F.Quiñones-Falconi, M.Galicia-Velasco, P.Marchiaro, V.Ballerini, M.Mussi, **A.J.Vila**, A.M. Viale, K. Bermejo-Morales, A.S.Limansky "Emergence of Pseudomonas aeruginosa Strains Producing Metallo- β -lactamases of the IMP-15 and VIM-2 types in Mexico", *Clin.Microbiol.Infect.*, **16**, 126-31 (2010).
71. F.Simona, A.Magistrato, M.Dal Peraro, A.Cavalli, **A.J.Vila** and P.Carloni "Common mechanistic features among metallo- β -lactamases: a computational study of *Aeromonas hydrophila* CphA enzyme", *J. Biol.Chem.*, **284**, 28164-71 (2009).
70. L.A.Abriata, G.N.Ledesma, R.Pierattelli and **A.J.Vila** "Electronic Structure of the Ground and Excited States of the Cu_A Site by NMR Spectroscopy" *J.Am.Chem.Soc.*, **131**, 1939-1946. (2009).
69. L.A.Abriata, A.Cassina, V.Tórtora, M.Marín, J.Souza, L.Castro, **A.J.Vila**, R.Radi "Nitration of Solvent-Exposed Tyrosine(s) on Cytochrome c Triggers Heme Iron-Methionine-80 Bond Disruption: Nuclear Magnetic Resonance and Optical Spectroscopy Studies", *J.Biol.Chem.*, **284**, 17-26 (2009). **Highlighted in the cover.**
68. P.E.Tomatis, S.M.Fabiane, F.Simona, P.Carloni, B.J.Sutton and **A.J.Vila**, "Adaptive protein evolution grants organismal fitness by improving catalysis and flexibility", *Proc.Natl.Acad.Sci.USA*, **105**, 20605-20610 (2008).
67. M.F.Tioni, L.I.Llarrull, A.A.Poeylout-Palena, M.A.Martí, M.Saggu, G.R.Periyannan, E.G.Mata, B.Bennett, D.H.Murgida and **A.J.Vila** "Trapping and Characterization of a Reaction Intermediate in Imipenem Hydrolysis by *B. cereus* Metallo- β -lactamase", *J.Am.Chem.Soc.*, **130**, 15852-15863 (2008).
66. L.I.Llarrull, M.F.Tioni and **A.J.Vila** "Metal Content and Localization during Turnover in *B.cereus* Metallo- β -Lactamase", *J.Am.Chem.Soc.*, **130**, 15842-15851 (2008).
65. L.A.Abriata, L.Banci, I.Bertini, S.Ciofi-Baffoni, P.Gkazonis, G.A.Spyroulias, **A.J.Vila**, S.Wang "Mechanism of Cu_A assembly", *Nature Chem.Biol.*, **4**, 599-601 (2008).
64. L.A.Abriata, L.J.González, L.I. Llarrull, P.E.Tomatis, W.K.Myers, A.L.Costello, D.L. Tierney and **A.J.Vila**, "Engineered mononuclear variants in *Bacillus cereus* Metallo-beta-lactamase BclI are inactive", *Biochemistry*, **47**, 8590-9 (2008).
63. P.Marchiaro, P.E.Tomatis, M.A.Mussi, F.Pasteran, A.M.Viale, A.S.Limansky and **A.J.Vila** "Biochemical characterization of metallo- β -lactamase VIM-11 from a Pseudomonas aeruginosa clinical strain", *Antimicrob.Agents Chemother.*, **52**, 2250-2 (2008).
62. P.Marchiaro, V.Ballerini, T.Spalding, G.Cera, M.A.Mussi, J.Morán-Barrio, **A.J.Vila**, A.M. Viale and A.S.Limansky "A convenient microbiological assay employing cell-free extracts for the rapid characterization of Gram-negative carbapenemase producers", *J.Antimicrob.Chemother.*, **62**, 336-344 (2008).
61. L.I.Llarrull, M.F.Tioni, J.Kowalski, B.Bennett and **A.J.Vila** "Evidence for a dinuclear active site in the metallo-beta-lactamase BclI with substoichiometric Co(II): a new mechanism for Co(II) uptake", *J.Biol.Chem.*, **282**, 30586 - 30595 (2007).

60. J.M.González, F.J.Medrano, A.L.Costello, D.L.Tierney and **A.J.Vila** "The Zn² Position in Metallo-β-Lactamases is Critical for Activity: A study on Chimeric Metal Sites on a Conserved Protein Scaffold", *J.Mol.Biol.*, **373**, 1141–1156 (2007).
59. G.N.Ledesma, D.H.Murgida, H.K.Ly, H.Wackerbarth, J.Ulstrup, A.J.Costa-Filho and **A.J.Vila** "The Met axial ligand determines the redox potential in CuA Sites", *J.Am.Chem.Soc.*, **129**, 11884-11885 (2007).
58. V.A.Campos-Bermudez, N.R.Leite, R.Krog, A.J.Costa-Filho, F.C.Soncini, G.Oliva and **A.J.Vila** "Biochemical and Structural Characterization of Salmonella typhimurium glyoxalase II: New insights in metal ion selectivity", *Biochemistry*, **46**, 11069-11079 (2007).
57. F.Simona, A. Magistrato, M.Vera, G. Garau, **A.J. Vila** and P.Carloni "Protonation state and substrate binding to B2 metallo-β-lactamase CphA from Aeromonas hydrophila", *Proteins*, **69**, 595-605 (2007).
56. A.A.Poeylout-Palena, P.E.Tomatis, A.I.Karsisiotis, C.Damblon, E.G.Mata and **A.J.Vila** "A Minimalistic Approach to Identify Substrate Binding Features in B1 Metallo-β-Lactamases", *Bioorg.Med.Chem.Lett.*, **17**, 5171–5174 (2007).
55. J.Morán-Barrio, J.M.González, M.N. Lisa, A.L.Costello, M.Dal Peraro, P.Carloni, B. Bennett, D.L.Tierney, A.S. Limansky, A.M.Viale and **A.J.Vila** "The Metallo-β-lactamase GOB is a mono-Zn(II) enzyme with a novel active site", *J.Biol.Chem.*, **282**, 18286-93 (2007). **Highlighted in the cover.**
54. L.I.Llarrull, S.M.Fabiane, J.M.Kowalski, B.Bennett, B.J.Sutton and **A.J.Vila** "Asp120 locates Zn² for optimal Metallo-β-Lactamase Activity", *J. Biol.Chem.*, **282**, 18276-18285 (2007). **Highlighted in the cover.**
53. M. Dal Peraro, **A.J.Vila**, P.Carloni and M. L.Klein "Role of zinc content on the catalytic efficiency of B1 metallo-β-lactamases", *J.Am.Chem.Soc.*, **129**, 2808-2816 (2007).
52. M. W. Crowder, J. Spencer and **A.J.Vila**, "Metallo-β-lactamases: Novel Weaponry for Antibiotic Resistance in Bacteria", *Acc. Chem.Res*, **39**, 721-728 (2006). *Review.*
51. G. E. Schujman, M.Guerin, A.Buschiazco, F.Schaeffer, L.I.Llarrull, **A.J.Vila**, P.M.Alzari and D.de Mendoza "Structural basis of lipid biosynthesis regulation in Gram-positive bacteria", *EMBO J.*, **25**, 4074-83 (2006).
50. G.Battistuzzi, M.Bellei, A.Leonardi, R.Pierattelli, A.De Candia, **A.J.Vila** and M.Sola "Reduction Thermodynamics of the T1 Cu-site in plant and fungal laccases", *J. Biol.Inorg.Chem.*, **10**, 867-73 (2005).
49. P.Marchiaro, M.A.Mussi, V.Ballerini, F.Pasterán, A.M.Viale, **A.J.Vila**, and A.S. Limansky "Sensitive EDTA-Based Microbiological Assays for the Detection of Metallo-β-lactamases in Non-Fermentative Gram-Negative Bacteria", *J. Clin.Microb.*, **43**, 5648-52 (2005).
48. P.E.Tomatis, R.M. Rasia, L.Segovia and **A.J.Vila** "Mimicking natural evolution in metallo-β-lactamases through second-shell ligand mutations", *Proc.Natl.Acad.Sci.USA*, **102**, 13761-13766 (2005). **Highlighted in the cover.**
47. A.M.Davies, R.M.Rasia, **A.J.Vila**, B.J. Sutton and S.M.Fabiane "Effect of pH on the active site of an Arg121Cys mutant of the metallo-β-lactamase from Bacillus cereus: Implications for the enzyme mechanism", *Biochemistry*, **44**, 4841-4849 (2005).
46. M.Dal Peraro, L.I.Llarrull, U.Rothlisberger, **A.J.Vila** and P.Carloni "Water-assisted reaction mechanism of monozinc β-lactamases", *J.Am.Chem.Soc.*, **126**, 12661-12668 (2004).
45. R.M. Rasia and **A.J.Vila**, "Structural determinants of substrate binding to *Bacillus cereus* metallo-β-lactamase", *J.Biol.Chem.*, **279**, 26046–26051 (2004).
44. M.Dal Peraro, **A.J.Vila**, and P. Carloni "Substrate Binding to Mononuclear Metallo-β-lactamase from *Bacillus cereus*", *Proteins*, **54**, 412-423 (2004).
43. R.M. Rasia and **A.J.Vila** "Mechanistic study of the hydrolysis of nitrocefin mediated by *B.cereus* metallo-β-lactamase" *Arkivoc*, X, 507-516 (2003). Volumen conmemorativo dedicado al Prof. E.A.Rúveda.

42. M. Dal Peraro, **A.J.Vila**, and P. Carloni "Protonation State of Asp120 in the Binuclear Active Site of the Metallo- β -lactamase from *Bacteroides fragilis*", *Inorg.Chem.*, **42**, 4245-4257 (2003).
41. R.M. Rasia, M.Ceolín and **A. J.Vila**, "Grafting a new metal ligand in the cocatalytic site of *B.cereus* metallo- β -lactamase: structural flexibility without loss of activity", *Protein Science*, **12**, 1538-1546 (2003).
40. C.O.Fernández, T. Niizeki, T. Kohzuma and **A.J.Vila** "Metal-ligand interactions in perturbed blue copper sites: A Paramagnetic ^1H NMR Study of Co(II)-pseudoazurin", *J.Biol.Inorg.Chem.*, **8**, 75-82 (2003).
39. L. Banci, R. Pierattelli and **A.J.Vila** "NMR of Copper Proteins", *Adv. Protein Chem.* (E. Gralla & J.S.Valentine, editores), **60**, 397-449 (2002).
38. A.R.Díaz; M.C.Mansilla, **A.J.Vila** and D. de Mendoza "Membrane topology of the acyl-lipid desaturase from *Bacillus subtilis*", *J.Biol.Chem.*, **277**, 48099-48016 (2002).
37. A.Donaire, B.Jiménez, C.O.Fernández, R.Pierattelli, T.Niizeki, J.M.Moratal, J.F.Hall, T.Kohzuma, S.S.Hasnain, and **A.J.Vila** "Metal-ligand interplay in blue copper proteins studied by ^1H NMR spectroscopy: Cu(II)-pseudoazurin and rusticyanin", *J. Am. Chem. Soc.*, **124**, 13698-13708 (2002).
36. M. Dal Peraro, **A.J.Vila**, and P. Carloni "Structural Determinants and H-Bond Network of Mononuclear Zinc- β -Lactamase Active Site", *J.Biol.Inorg.Chem.*, **7**, 704-712 (2002).
35. G. L. Estiú, R.M.Rasia, J.A.Cricco, **A.J.Vila** and M. E. Zerner "Is there a bridging ligand in metal-substituted β -lactamases?: A spectroscopic and theoretical answer", *Int.J.Quantum Chem.*, **88**, 118-132 (2002).
34. R.M. Rasia and **A.J.Vila**, "Exploring the role and the binding affinity of a second zinc equivalent in *B.cereus* metallo- β -lactamase", *Biochemistry*, **41**, 1853-1860 (2002).
33. I. Bertini, D.A. Bryant, S.Ciurli, A. Dikiy, C. O. Fernández, C. Luchinat, N. Safarov, **A.J.Vila** and J. Zhao "Backbone dynamics of plastocyanin in both oxidation states. Solution structure of the reduced form and comparison with the oxidized state", *J. Biol.Chem.*, **276**, 47217-47226 (2001).
32. C. O. Fernández, J. A. Cricco, C. E. Slutter, J.H.Richards, H.B.Gray and **A.J.Vila**, "Weak Axial Ligand Modulation of the Electronic Structure of CuA Sites: A Paramagnetic ^1H NMR Study of Met160Gln CuA", *J.Am.Chem.Soc.*, **123**, 11678-11685 (2001).
31. I Bertini, S.Ciurli, A. Dikiy, C. O. Fernández, C. Luchinat, N. Safarov, S. Shumilin and **A.J.Vila** "The first solution structure of an oxidized paramagnetic copper(II) protein: The case of plastocyanin from the cyanobacterium *Synechocystis* sp. PCC 6803", *J. Am. Chem. Soc.*, **123**, 2405-2413 (2001).
30. I.Bertini, C.O.Fernandez, C.Luchinat, B.G.Karlsson, J.Leckner, B.Malmström, A.M. Nersissian, R.Pierattelli, E.Shipp, J.S.Valentine and **A.J.Vila** "Structural information through NMR hyperfine shifts in blue copper proteins" *J. Am. Chem. Soc.*, **122**, 3701-3707 (2000).
29. J.A.Cricco and **A.J.Vila** "Class B β -lactamases: the importance of being metallic", *Current Pharm. Design*, **5**, 915-928 (1999). *Review*.
28. J.A.Cricco, R.M.Rasia, E.G. Orellano, E.A.Ceccarelli, and **A.J.Vila** "Metallo- β -lactamases: Does it take two to tango?" *Coord.Chem.Rev.*, **190-192**, 519-535 (1999). *Review*.
27. E.G. Orellano, J.E.Girardini, J.A.Cricco, E.A.Ceccarelli, and **A.J.Vila** "Spectroscopic Characterization of the Binuclear Metal Site in *Bacillus cereus* β -lactamase II", *Biochemistry*, **37**, 10173-80 (1998).
26. C.O.Fernández, A.I. Sannazzaro, L.E. Díaz, and **A.J.Vila** "Probing the Metal Site in *Rhus vernicifera* Stellacyanin by Ni(II)-Substitution and Paramagnetic NMR Spectroscopy" *Inorg.Chim.Acta*, **273**, 367-71 (1998). Volumen conmemorativo dedicado al Prof. Ivano Bertini.
25. **A.J.Vila**, B.E.Ramírez, A.J.di Bilio, T.J.Mizoguchi, J.H.Richards, and H.B.Gray "Paramagnetic NMR Spectroscopy of Co(II) and Cu(II) Derivatives of *Pseudomonas aeruginosa* His46Asp Azurin", *Inorg. Chem.*, **36**, 4567-4570 (1997).

24. C.O.Fernández, A.I. Sannazzaro, and **A.J.Vila** "Alkaline Transition in Stellacyanin, an Unusual Blue Copper Protein", *Biochemistry*, **36**, 10566-10570 (1997).
23. C.O.Fernández, O.Podestá, D.A.Converso, M.E.Fernández, **A.J.Vila** "A Biophysical Characterization of the Iron Coordination Environment in Wheat Germ Peroxidase" *J.Biol.Inorg.Chem.*, **2**, 218-224 (1997).
22. **A.J.Vila**, C.O.Fernández "The Structure of the Metal Site in *Rhus vernicifera* Stellacyanin: A Paramagnetic NMR Study on its Co(II)-derivative" *J. Am. Chem. Soc.*, **118**, 7291-7298 (1996).
21. L.Banci; I.Bertini; M.Tien, R.Pierattelli and **A.J.Vila** "Factoring of the Hyperfine Shifts in the Cyanide Adduct of Lignin Peroxidase from *P. chrysosporium*" *J. Am. Chem. Soc.*, **117**, 8659-8667 (1995).
20. **A.J.Vila** "A ^1H NMR NOE Study on Co(II) Stellacyanin. Some Clues about the Structure of the Metal Site" *FEBS Letters*, **355**, 15-18 (1994).
19. L.Banci, I.Bertini, R.Pierattelli and **A.J.Vila** " ^1H - ^{13}C HETCOR Investigations on Heme-containing systems" *Inorg. Chem.*, **33**, 4338-4343 (1994).
18. C.M.Lagier, **A.J.Vila** and A.C.Olivieri "Shifting of the keto-enol equilibrium in dibenzoylmethane by methyl substitution. An AM1 Study" *J.Mol.Struct. (Theochem)*, **309**, 59-64 (1994).
17. I.Bertini, B.-H.Jonsson, C.Luchinat, R.Pierattelli, and **A.J.Vila** "Strategies of Signal Assignments in Paramagnetic Metalloproteins. An NMR Investigation of the Thiocyanate Adduct of the Cobalt(II)-Substituted Human Carbonic Anhydrase II" *J.Magn.Reson., Section B*, **104**, 230-239 (1994).
16. R.A.Spanevello and **A.J.Vila** "7- α -Acetoxyhardwickiic Acid: A New Furanoid Clerodane" *Phytochemistry*, **35**, 537-538 (1994).
15. I.Bertini, F.Capozzi, C.Luchinat, M.Piccioli and **A.J.Vila** "The Fe_4S_4 Centers in Ferredoxins Studied through Proton and Carbon Hyperfine Coupling. Sequence Specific Assignments of Cysteines in Ferredoxins from *Clostridium acidi urici* and *Clostridium pasterianum*" *J. Am. Chem. Soc.*, **116**, 651-660 (1994).
14. L.Banci, I.Bertini, I.-C.Kuan, M.Tien. P.Turano and **A.J.Vila** "NMR Investigation of Isotopically Labeled Cyanide Derivatives of Lignin Peroxidase and Manganese Peroxidase" *Biochemistry*, **32**, 13483-13489 (1993).
13. I.Bertini, P.Turano and **A.J.Vila** "NMR of Paramagnetic Metalloproteins" *Chem. Reviews*, **93**, 2833-2932 (1993). *Review*.
12. **A.J.Vila**, R.M.Craverro and M.González Sierra "Stereoselective Route to Highly Functionalized 4a,8a-substituted 1,2,3,4,4a,6,8a,9, 10,10a-Decahydrophenanthrenes. A New Entry to the Quassinoid and Fusidane Frameworks" *Tetrahedron*, **21**, 4511-4526 (1993).
11. I.Bertini, G.Gori, C.Luchinat and **A.J.Vila** "One and two-dimensional NMR Characterization of Oxidized and Reduced Cytochrome c' from *Rhodocyclus gelatinosus*" *Biochemistry*, **32**, 776-783 (1993).
10. **A.J.Vila**, C.M.Lagier and A.C.Olivieri "C,O Atomic Motion Associated with Solid-State Proton Transfer in Enolic 1,3-Diketones" *J. Mol. Struct.*, **274**, 215-222 (1992)
9. I.Bertini, C.Luchinat, R.Pierattelli and **A.J.Vila** "The Interaction of Acetate and Formate with Cobalt Carbonic Anhydrase. An NMR study" *Eur. J. Biochem.*, **208**, 607-615 (1992).
8. I.Bertini, C.Luchinat, R.Pierattelli and **A.J.Vila** "A Multinuclear Ligand NMR Investigation of Cyanide, Cyanate and Thiocyanate Binding to Zinc and Cobalt Carbonic Anhydrase" *Inorg. Chem.*, **31**, 3975-3979 (1992).
7. **A.J.Vila**, C.M.Lagier and A.C.Olivieri "Proton Transfer in Solid 1-phenyl butane-1,3-dione and related 1,3-diones as studied by ^{13}C CPMAS and AM1 Calculations" *J. Phys. Chem.*, **95**, 5069-5073 (1991).
6. **A.J.Vila**, C.M.Lagier, A.C.Olivieri and G.Wagner " ^{31}P Solid-State NMR Spectra of Crystalline Phosphoric Acid and their Relation to the Structure of Urea Phosphate" *J. Chem. Soc., Chem. Commun.*, 683-685 (1991).

5. **A.J.Vila**, R.M.Cravero and M González Sierra "The Reductive Alkylation of Aromatic Ketones Revisited. A New Stereoselective Route to Highly Functionalized 4a,8a-substituted 1,2,3,4,4a,6,8a,9,10,10a Decahydro- phenanthrenes" *Tetrahedron Letters*, **32**, 1929-1932 (1991).
4. **A.J.Vila**, C.M.Lagier and A.C.Olivieri "High Resolution Solid-State NMR Study of Reversible 1,5 Proton Shifts in Organic Solids" *Magn. Reson. Chem.*, **28**, S29-36 (1990).
3. **A.J.Vila**, C.M.Lagier and A.C.Olivieri "¹³C NMR and AM1 Study of the Intramolecular Proton Transfer in Solid 1,3-diphenyl-1,3-propanedione" *J. Chem. Soc., Perkin Trans. 2*, 1615-1618 (1990).
2. **A.J.Vila** and M.González Sierra "Hydroxyl Substituent Effects on 13C NMR Spectra of 4a-Methyl Octahydrophenanthrenes" *Spectroscopy Letters*, **22**, 1291-1299 (1989).
1. **A.J.Vila**, R.A.Spanevello, A.C.Olivieri, M.González Sierra, and J.D.McChesney "Conformational Analysis of the 4a-Methyl Octahydrophenanthrene System. A Spectroscopic and Theoretical Approach" *Tetrahedron*, **45**, 4951-4960 (1989).

CAPÍTULOS DE LIBROS

5. M.M. González and **A J. Vila** "An Elusive Task: A Clinically Useful Inhibitor of Metallo- β -Lactamases", in "Zinc Enzyme Inhibitors: Enzymes from Microorganisms", from the series "Topics in Medicinal Chemistry", Supuran, Claudiu T., Capasso, Clemente (Eds.) Springer (2016).
4. L.A.Abriata, M.E.Zaballa and **A.J.Vila** "New Approaches for the Study of Paramagnetic Metalloproteins", in "Advances in BioNMR Spectroscopy" (S. Pascal, A. Dingley, editors), IOS Press, Amsterdam, volumen 3, 97-114 ISBN 978-1-60750-694-2 (2011).
3. M.Dal Peraro, **A.J.Vila** and Paolo Carloni "Catalytic Mechanism of Metallo- β -lactamases:Insights from calculations and experiments", in "Quantum Biochemistry", Wiley VCH (Cherif Matta, editor), 605-622, 2010.
2. C.O.Fernández and **A.J.Vila** "Paramagnetic NMR of Electron Transfer Copper Proteins", in "Paramagnetic Resonance of Metallobiomolecules" (J.Telser, editor), ACS Symposium Series, American Chemical Society, pp. 287-303 (2003).
1. **A.J.Vila** and C.O.Fernández "Copper in Electron-Transfer Proteins", en "Handbook of Metalloproteins" (A. Sigel, H. Sigel & I. Bertini, editores), Marcel Dekker, New York, pp 813-856 (2001).

TRABAJOS PUBLICADOS EN REVISTAS SIN REFERATO

1. C.O.Fernández, **A.J.Vila** "Estudio de la coordinación de Cisteínas en Proteínas Azules de Cobre" *Anales de la Academia de Ciencias Exactas, Físicas y Naturales*, **48**, 181-189 (1996) (trabajo escrito por invitación con motivo del otorgamiento del premio E.Galloni).

ARTÍCULOS DE DIVULGACIÓN

- "Metallo- β -lactamasas: Las bacterias contraatacan", Suplemento de Ciencia y Técnica, "Diario de Sevilla" y diario "El día" de Córdoba (España), junio 2001.
- "Nueva Simbiosis entre la química orgánica y la química biológica", Ciencia Hoy, Volumen 21 - Nº 124 Agosto - Septiembre 2011. ISSN 1666-5171. número especial dedicado al Año Internacional de la Química.

OTROS ANTECEDENTES

PARTICIPACIÓN U ORGANIZACIÓN DE EVENTOS CYT

ORGANIZACIÓN DE EVENTOS CIENTÍFICOS

- Miembro del Comité Organizador de la XXII Reunión Científica de la Sociedad Argentina de Biofísica, Maciel (Rosario), diciembre de 1993.
- Organizador del Primer Workshop Argentino de Química Bioinorgánica, Rosario, 2004.
- Miembro del International Organizing Committee, First Latin American Protein Society Meeting, Angra dos Reis, Brasil, 2004.
- Organizador de la XXXV Reunión Anual de la Sociedad Argentina de Biofísica, Rosario, noviembre de 2006.
- Chairman, Third Latin American Protein Society Meeting, Salta, 2010.
- Organizador “ Segundas Jornadas de Ciencia y Tecnología”, Bolsa de Comercio de Rosario, 2012.
- Miembro del Scientific Committee , ISMAR (International Society for Magnetic Resonance) meeting 2013.
- Miembro del Scientific Committee, 4th LABIC (Latin American Meeting on Biological Inorganic Chemistry), 2014.
- Organizador, Workshop en Biología Estructural, EMBL, Rosario, 2015.
- Miembro del Comité Organizador, X Iberoamerican NMR Meeting, Cartagena de Indias, Colombia, 2016.
- Chair, 2nd Latin American Metabolic Profiling Symposium, Rosario, 2016.
- Co-Chair, ICBIC-18 (International Conference for Biological Inorganic Chemistry), Brasil, 2017.

PARTICIPACIÓN EN CONGRESOS, REUNIONES Y SIMPOSIOS

Ha realizado numerosas presentaciones en congresos nacionales e internacionales.

Ha sido invitado como conferencista en las siguientes reuniones científicas y congresos. **En este listado no se incluyen posters seleccionados para comunicaciones orales, sino conferencias por invitación:**

NACIONALES

1. “Uso de la resonancia magnética nuclear para el estudio de la relación estructura-función en metaloproteínas paramagnéticas”, XXII Reunión Anual, Sociedad Argentina de Biofísica, Maciel, diciembre 1993. Conferencista invitado en simposio.
2. “Estudios espectroscópicos de los efectos de mutaciones orgánicas e inorgánicas en metaloproteínas”, XXXI Reunión Anual, SAIB, Villa Giardino, noviembre 1995. Conferencista invitado en simposio.
3. “Centros metálicos en proteínas: Déme dos”. 34 Reunión Anual, Sociedad Argentina de Investigaciones en Bioquímica y Biología Molecular, Mendoza, noviembre 1998. Conferencista invitado en simposio.
4. “Estructura electrónica de centros de cobre en proteínas de cobre de transferencia electrónica” X Congreso Argentino de Físicoquímica, Santa Fe, abril 1999. Conferencista invitado en simposio.
5. “Estudios estructurales en metaloproteínas mediante RMN”, Simposio de Biología Molecular Estructural, Instituto de Investigaciones Bioquímicas “Luis F.Leloir”, Buenos Aires, diciembre 1999. Conferencista invitado.
6. “Proteínas de cobre de transferencia electrónica: el color y sus consecuencias”, Reunión Anual, Sociedad Argentina de Biofísica, Tafí del Valle, 2001. Conferencista invitado en simposio.
7. “¿Qué puede hacer un químico en sistemas biológicos? Proteínas de cobre de transferencia electrónica, un paradigma en química bioinorgánica” Congreso Nacional de Estudiantes de Química, Tucumán, 2003. Conferencista invitado.

8. "Determinantes estructurales de reactividad y unión de sustrato en Metallo- β -lactamasas", Simposio de Biología Molecular Estructural, Fundación Instituto Leloir, Buenos Aires, 2004. Conferencista invitado.
9. "Evolution and catalytic mechanism of Metallo- β -Lactamasas", Coloquio Argentino-Alemán de Biotecnología y Química, Tucumán, 2004. Conferencista invitado.
10. "Estructura, función y evolución de metalo-beta-lactamasas, enzimas modulares diseñadas para la resistencia bacteriana a antibióticos", Congreso Conjunto de Sociedades Biomédicas, Mar del Plata, 2004. Conferencista invitado.
11. "RMN de metaloproteínas paramagnéticas", Tercer Workshop de Química Bioinorgánica DQIAQF e INQUIMAE, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Buenos Aires, 2008. Conferencista invitado.
12. "Catalytic Mechanism and Evolution of Metallo- β -Lactamasas", XXVII Congreso Argentino de Química "Dr. Pedro J. Aymonino", Tucumán, 2008. Conferencia Plenaria.
13. "Reconocimiento de sustrato y evolución de metalo- β -lactamasas: un juego perverso entre promiscuidad y diversidad", XXIII Jornadas Argentinas de Microbiología, Asociación Argentina de Microbiología, Rosario, 2008. Conferencia Inaugural.
14. "0-800-COBRE: Delivery de metales y electrones en la cadena respiratoria" XXXVII Congreso de la Sociedad Argentina de Biofísica, La Plata, 2008. Conferencia Plenaria.
15. "0-800-COBRE: Delivery de metales y electrones a la luz de la RMN" XVI Congreso Argentino de Fisicoquímica y Química Inorgánica, Salta, 2009. Conferencia Plenaria.
16. XII Congreso Argentino de Microbiología, VI Congreso de la Sociedad Argentina de VI bacteriología, Micología y Parasitología Clínica-SADEBAC, I Congreso de Microbiología Agrícola y Ambiental- COORDINADOR. 2010.
17. "Catalytic Mechanism, Evolution and Dynamic Features of Zinc Beta-lactamasas: A novel perspective into antibiotic resistance", DAAD, Protein Dynamics And Reactivity Horco Molle, Tucumán – Septiembre, 2011.
18. "Biophysical and structural traits in protein evolution", EMBL, Biología Molecular de Avanzada, Buenos Aires, 2012.
19. "Es posible predecir la evolución de los mecanismos de resistencia", XIV Congreso Argentino de la Sociedad Argentina de Infectología, Rosario- Mayo, 2014.
20. "Metallo-beta-lactamasas: La última frontera de resistencia a carbapenemes en Enterobacterias, podemos detenerlas?", conferencia inaugural, Jornadas Argentinas de Microbiología 2014, Córdoba, Argentina, Agosto, 2014.
21. "Nuevos mecanismos de resistencia a antibióticos y diseño de fármacos", XXV Jornadas Científicas Anuales ACREM, Rosario, Argentina, Octubre, 2014.
22. "NMR applied to Metabolomics in Human Health", First ICGEB Workshop on "Human Papillomavirus: From Basic Biology to Cervical Cancer Prevention", Molecular Biology of Leishmania, ICGEB, Plenary lecture Technological innovation and clinical applications, Rosario, Noviembre, 2014.
23. "Análisis metabolómico en salud humana: Aplicaciones y desafíos", LIX Reunión Científica Anual de la Sociedad Argentina de Investigación Clínica (SAIC) y LXII Reunión Anual de la Sociedad Argentina de Inmunología (SAI), Mar del Plata, Noviembre, 2014.
24. "How do Sco Proteins Score the COX?", XLIII Reunión Annual de la Sociedad Argentina de Biofísica, Sierra de la Ventana, Diciembre 2014.
25. "Towards a Rational Control of the Electronic Structure of Electron Transfer Metalloproteins", 13ª Conferencia Latinoamericana de Fisicoquímica Orgánica, Villa Carlos Paz, Córdoba del 17 al 21 de mayo de 2015.
26. "Mecanismo catalítico, inhibición y evolución de metalo- β -lactamasas", XX CAFQI, Villa Carlos Paz, Córdoba del 16 al 19 de mayo de 2017.
27. "The last frontier of antibiotic resistance: at the heart of protein evolution", Reunión Conjunta de Sociedades de Biociencia, Buenos Aires del 13 al 17 de Noviembre de 2017.

INTERNACIONALES

28. "Paramagnetic NMR as a characterization tool for blue copper proteins", XXXII International Conference on Coordination Chemistry (Santiago de Chile, agosto 1997). Session lecturer.
29. "Paramagnetic NMR studies in electron transfer copper proteins", III Iberoamerican Congress of Biophysics, Buenos Aires, setiembre 1997. Session lecturer.
30. "Paramagnetic NMR Studies in Electron Transfer Copper Proteins", 4th European Conference on Bio-inorganic Chemistry, Sevilla, España, julio 1998. Session lecturer.
31. "Structure-function relationship in a Binuclear Zinc β -Lactamase" XXXIII International Conference on Coordination Chemistry, Florencia, Italia, agosto 1998. Session lecturer.
32. "Metallo- β -lactamases: Does it take two to tango?" IX International Conference on Biological Inorganic Chemistry (Minneapolis, USA, 1999). Session lecturer.
33. "Paramagnetic NMR Studies in Electron Transfer Copper Proteins" XIX International Conference on Magnetic Resonance in Biological Systems (Florencia, Italia, 2000). Session lecturer.
34. "NMR Spectroscopy of Paramagnetic Metalloproteins", International Workshop on Spectroscopy for Biology (Sao Paulo, Brasil, 2000). Conferencia invitada.
35. "Metal Site Redesign in a Zinc β -Lactamase", X International Conference on Biological Inorganic Chemistry (Florence, Italy, 2001). Session lecturer.
36. "Re-engineering the Active Site Redesign in Metallo β -Lactamases", IX Workshop on Metallo- β -Lactamases (Holy Island, Inglaterra, 2002). Conferencia invitada.
37. "Metal Site Redesign in a Metallo- β -Lactamase" (International Biophysics Congress, Buenos Aires, 2002). Session lecturer.
38. "Electronic structure of paramagnetic electron transfer copper centers in proteins by NMR", International Colloquia on NMR in Biology (Florencia, Italia, 2002). Session lecturer.
39. "NMR Spectroscopy of Paramagnetic Electron Transfer Copper Proteins" Gordon Research Conference "Metals in Biology" (Ventura, USA, 2003). Session lecturer.
40. "Metal Site Re-engineering in Zinc β -lactamases" (Workshop on Structure and Function of Metalloproteins, Mito, Japón, 2003). Conferencia invitada.
41. "NMR Spectroscopy of Paramagnetic Electron Transfer Copper Proteins" (Okazaki, Japón, 2003). Conferencia invitada.
42. "Rational and Combinatorial Redesign of Metallo- β -lactamases" 7th International Symposium on Applied Bioinorganic Chemistry (Guanajuato, Mexico, 2003). Session lecturer.
43. "Paramagnetic NMR Spectroscopy of Electron Transfer Copper Proteins", Workshop on Nuclear Magnetic Resonance in Biology (Campinas, Brasil, 2004). Conferencia invitada.
44. "Metal substitution for probing zinc enzymes active sites in the resting state and during turnover", 2nd International Workshop on Spectroscopy for Biology (Rio de Janeiro, marzo 2004). Conferencia invitada.
45. "Zinc β -lactamases: modular metalloenzymes designed for antibiotic resistance", 36th International Conference on Coordination Chemistry ICC (Mérida, Mexico, julio 2004). Conferencia invitada.
46. "In vitro evolution and rational redesign of the catalytic machinery of metallo-beta-lactamases", First Latin American Protein Society Meeting (Angra dos Reis, Brasil, noviembre 2004). Conferencia invitada.
47. "NMR Spectroscopy of electron transfer copper proteins", 1st Iberoamerican NMR Meeting (Angra dos Reis, Brasil, mayo 2005). Conferencia invitada.
48. "Substrate recognition and directed evolution of *B.cereus* metallo- β -lactamase", 9th Workshop on beta-lactamases (Leonessa, Italia, junio 2005). Conferencia invitada.

49. "Directed Evolution in Metallo- β -Lactamases: Natural vs. in vitro Fine Tuning of Enzyme Activity", 34 Reunion Anual, Sociedade Brasileira de Bioquímica e Biologia Molecular – SBBq (Aguas de Lindoia, julio 2005). Conferencia invitada.
50. "Diversity, evolution and mechanism of zinc β -lactamases", XII International Conference on Biological Inorganic Chemistry (Ann Arbor, Michigan, julio 2005). Conferencia invitada.
51. "Diversity, evolution and mechanism of zinc β -lactamases", Conference on Drug Development for the Third World (Trieste, Italia, junio 2006)
52. "Catalytic mechanism and evolution of metallo- β -lactamases", 8th European Conference in Biological Inorganic Chemistry (Aveiro, Portugal, julio 2006).
53. "Structural diversity, catalytic mechanism and evolution of metallo- β -lactamases" Symposium "The Biological Chemistry of Macromolecules" Cinvestav (Mexico, septiembre 2006).
54. "Evolution of substrate specificity in class B β -lactamases", 46th Interscience Conference on Antimicrobial Agents and Chemotherapy (San Francisco, USA, noviembre 2006).
55. "NMR Studies of Electron-Transfer Copper Proteins", 11th Nuclear Magnetic Resonance Users Meeting (Angra dos Reis, Brasil, Mayo 2007).
56. "Substrate recognition by metallo- β -lactamases: Selectivity, promiscuity and evolution", International Symposium on Molecular Recognition Phenomena in Biopolymers (Real Academia Sevillana de Ciencias, Sevilla, mayo 2007).
57. "Effect of remote and second shell mutations in enzymes from the metallo- β -lactamase superfamily", 6th International Conference of Biological Physics (Montevideo, agosto 2007).
58. "Structural studies and electron transfer on Cytochrome *c* Oxidases", V International Conference on Peroxynitrite and Reactive Nitrogen Species "Free Radicals in Montevideo", (Montevideo, septiembre 2007).
59. "3D and electronic structure of copper proteins by NMR", 800 MHz NMR Facility Inauguration Symposium and 2nd Annual Meeting of the Millennium Institute for Structural Biology in Biomedicine and Biotechnology (Rio de Janeiro, septiembre 2007).
60. "Dissecting evolutionary traits in Zinc β -lactamases", LAPS 2nd Latin American Protein Society Acapulco, (Noviembre 2007).
61. "Catalytic mechanism and evolution of metalo- β -lactamases", Workshop Max-Planck, "Multiparametric probes and agents of cellular function", Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Buenos Aires, Argentina (Noviembre 2007).
62. Mechanistic studies on *B.cereus* metallo- β -lactamase BcII", 10th β -Lactamase Meeting, Eretria, Grecia, (Mayo-Junio 2008).
63. "Catalytic Mechanism and Evolutionary traits of zinc β -lactamases: Does it take two to tango?" Chinese Chemical Conference, China, (Julio 2008).
64. "NMR Studies on Multinuclear Copper Proteins", 6^o International Copper Meeting: Copper and Related Metals in Biology, Alghero, (Octubre 2008).
65. "Adaptive Evolution of Metallo-beta-Lactamases Grants Organismal Fitness by Improving Catalysis and Flexibility", Gordon Research Conference "Microbial Population Biology", Boston, 2009.
66. "Catalytic Mechanism and Evolutionary Traits of zinc β -lactamases: Does it take two to tango?", 3rd European Conference on Chemistry for Life Sciences, Frankfurt, 2009.
67. "Structure, Catalysis and Evolution of zinc β -lactamases", VII Iberoamerican Congress of Biophysics, Buzios, 2009.
68. "Mecanismo catalítico, estructura y evolución de metalo-beta-lactamasas: Darwin a escala molecular" Conferencia Inaugural, 1er Encuentro Nacional de Química (Montevideo, noviembre 2009).
69. "Prospects for inhibition of metallo-beta-lactamases" 20th European Congress of Clinical Microbiology and Infectious Diseases (Viena, abril 2010).

70. "Invisible states in paramagnetic copper proteins", Joint EUROMAR 2010 and 17th ISMAR Conference (Florencia, julio 2010).
71. "Catalytic Mechanism and Evolutionary traits of zinc β -lactamases: Does it take two to tango?" XI International Symposium on Inorganic Biochemistry (Kudowa Zdrój, Polonia, Septiembre 2010).
72. "Invisible states in paramagnetic copper proteins studied by NMR", 13th NMR User meeting of the Brazilian AUREMN (Angra dos Reis, Brasil, Mayo 2011)
73. "Invisible states in paramagnetic copper proteins studied by NMR", 241st ACS National Meeting, (Anaheim, California, 2011)
74. "Catalytic Mechanism and Evolutionary Traits of Zinc β -Lactamases: Does It Take Two to Tango?", VII Reunión Científica de Bioinorgánica", Águilas (España, Julio 2011)
75. "Metal Site Redesign in a Zinc beta-Lactamase", ICBIC 15, (Vancouver, Canadá, 2011).
76. "Mechanistic clues for the inhibition of zinc β -lactamases", 243rd ACS National Meeting & Exposition, Marzo 25- 29 (San Diego, California, 2012).
77. "Fine tuning of the electronic structure of the dinuclear copper site CuA", XVI Brazilian Meeting on Inorganic Chemistry, BMIC (Florianopolis, Brasil, 2012).
78. "Mechanistic clues for the inhibition of zinc beta-lactamases", 52 ICAAC, Septiembre 2012, (San Francisco, California).
79. "Metallo-beta-lactamases: antibiotic resistance and the role of periplasmic Zn(II)", Zing Conference; Bioinorganic Chemistry Conference, (Lanzarote, España, 2013).
80. "Catalytic mechanism and evolutionary traits of Zn-dependent beta-lactamases", XII Symposium on Metal Ions in Biology and Medicine, Marzo 2013, (Montevideo, Uruguay)
81. "Mechanism-based design of four novel metallo beta-lactamase broad spectrum bithiazolidine inhibitors", 23rd ECCMID, Abril 2013 (Berlin Germany).
82. "Alternative ground states in copper proteins unveiled by NMR spectroscopy: A novel view for biological electron transfer", The Magnetic Resonance in Biology workshop in São Paulo, May 16 – 17, 2013, (Brasil).
83. "Alternative ground states in copper proteins unveiled by NMR spectroscopy: A novel view for biological electron transfer", 18th ISMAR Meeting, 14th NMR Users Meeting, Vth Iberoamerican NMR Meeting Biomedical Imaging Symposium, Mayo 2013, (Rio de Janeiro, Brasil).
84. "Alternative ground states in the CuA center and its possible role in electron transfer", ICBIC 16, Julio 22-26 2013 (Grenoble, Francia).
85. "Alternative ground states in the electronic structure of the CuA center and their possible role in electron transfer", Simposio latinoamericano de química de coordinación y organometálica, Octubre 13-17 2013 (Huatulco, México).
86. "Dissection of the in vivo interplay of molecular features determining protein evolution", XII PABMB Congress, Noviembre 9-14 2013 (Puerto Varas, Chile).
87. 1st Latin-American Symposium on Metabolic Profiling promoted by the Latin American Metabolic Profiling Society, Mayo, 2014. (Lima, Perú).
88. "Decision-making processes in biological electron transfer: Conformational selection vs. electronic ground state selection by NMR", 13th Chianti/INSTRUCT Workshop Magnetic Resonance for Cellular Structural Biology, Junio, 2014. (Grosseto, Italy).
89. "Mechanism based inhibitors of metallo-beta-lactamases", 12th Beta-Lactamase Meeting International Workshop, Junio, 2014. (Gran Canaria, España)
90. "Mechanism, evolution and inhibition of Zn(II)-dependent lactamases: a new global threat", IV Latin American Meeting on Biological Inorganic Chemistry - V WOQUIBIO, Chascomús, Argentina, Agosto, 2014.
91. "Unraveling the mechanism of assembly of the CuA center in cytochrome oxidases", Latin American summit meeting on "Biological Crystallography and Complementary Methods", Septiembre, 2014. (Campinas, Brasil).

92. "Unraveling the mechanism of assembly of the CuA center in cytochrome oxidases", 9th International Copper Meeting, Octubre, 2014. (Vico Equense, Italia).
93. "Catalytic Mechanism and Inhibitor Design of Zinc-lactamases: Does it Take Two to Tango?", Semana de la Química en Florianopolis. Junio, 2015.
94. "Fine tuning of the catalytic efficiency and metal binding features in metalloenzymes by Outer Sphere residues", ACS, Agosto, 2015. (Boston, USA).
95. "The evolution pathway of beta-lactamases", ICAAC, Septiembre, 2015. (San Diego, USA).
96. "Role of the metal binding loops in cofactor assembly and electronic structure of a copper site in cytochrome oxidases", Latin American Crosstalk in Biophysics, Noviembre 2015. (Salto, Uruguay).
97. "Slow protein dynamics probed by NMR: at the heart of protein evolvability" Chianti Workshop "Magnetic Resonance for Cellular Structural Biology" (Grosseto, Italy, 2016). Invited Speaker.
98. "Novel molecular mechanisms improving fitness in zinc-dependent carbapenemases" Gordon Research Conference on Drug Resistance. Invited Speaker (2016).
99. "Slow protein dynamics probed by NMR: at the heart of protein evolvability" IberoAmerican NMR meeting. (Cartagena, Colombia). Invited Speaker (2016)
100. "Metallo-beta-lactamases in the periplasm: Raiders of the lost Zinc?", LABIC, (Queretaro, Mexico, 2016). Invited Speaker.
101. "Novel molecular mechanisms improving fitness in zinc-dependent carbapenemases", V LAPS Meeting (Rio de Janeiro, Brasil, 2016). Invited Speaker.
102. "ASM Microbe" (New Orleans, USA, 2017). Invited Speaker.
103. "A general reaction mechanism for mono-and binuclear metallo beta lactamses", 13th Beta Lactamase Meeting (L'Aquila, Italia, 2017). Invited Speaker.
104. "Metallo-Beta-Lactamases: Periplasmic Raiders of the Lost Zinc", Gordon Research Conference on the "Cell Biology of Metals", (Vermont, USA, 2017). Invited Speaker.
105. "Active site loop of metallo-B-lactamases tunes metal site coordination and affects catalysis by second sphere interactions, ICBIC 18 (Florianopolis, Brasil, 2017).
106. "Metal site engineering in the cupredoxin protein fold", SILQCOM (Iguazú, Argentina, 2017). Invited Speaker.
107. "Workshop satélite (Bogotá, Colombia, 2017). Invited Speaker.
108. "Molecular traits improving fitness in zinc-dependent carbapenemases: Mind the gap!" 6º Congreso de la rama de fisicoquímica, estructura y diseño de proteínas (Durango, México, Noviembre 2017)

Ha sido invitado a dar seminarios en las siguientes instituciones en el país: Departamento de Química Orgánica, INQUIMAE (Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Buenos Aires); Instituto de Agrobiotecnología del Litoral (IAL); Departamento de Química Biológica, Facultad de Bioquímica y Farmacia (Universidad de Buenos Aires); CIQUIBIC; INFIQC; Facultad de Ciencias Químicas (Universidad Nacional de Córdoba); Facultad de Ciencias Exactas (Universidad Nacional de La Plata); Facultad de Farmacia y Bioquímica (Universidad Nacional del Litoral); Instituto de Investigaciones Bioquímicas Luis F. Leloir (UBA); INGEBI (UBA); Instituto de Investigaciones Biotecnológicas (Univ. Nac. San Martín); INTECH (Chascomús); Centro Atómico Bariloche, Instituto de Física Rosario (IFIR), Instituto de Química Rosario (IQUIR).

Ha sido invitado a dar seminarios en las siguientes instituciones en el extranjero: Department of Chemistry, Oxford University (UK); Department of Chemistry and Chemical Engineering, California Institute of Technology (Pasadena, USA); European Molecular Biology Laboratory (Heidelberg); Department of Chemistry, MIT; BIOMAC Research School, Leiden Institute of Chemistry (University of Leiden, Holanda); Departamento de Química Inorgánica, Universitat de València (España); International Centre for Theoretical Physics (Trieste, Italia); International School for Advanced Studies-SISSA (Trieste, Italia); Departamento de Bioquímica,

Università di Roma “Tor Vergata”; Centro de Estudios Atómicos - Sección de Bioenergética (Saclay, Francia); Instituto Pasteur (París, Francia); Instituto Rocasolano-CSIC (Madrid, España); Department of Chemistry, University of Florianópolis (Brazil); Center of Magnetic Resonance & Department of Chemistry (Universidad de Firenze, Italia); Department of Chemistry y Department of Biochemistry and Microbiology (University of Sydney, Australia); Department of Chemistry (Yale University); Department of Chemistry (Penn State University); Biochemistry (University of California, Los Angeles, USA); Instituto de Biotecnología (Universidad Autónoma de México, Cuernavaca); Instituto de Química (Universidad Autónoma de México); Max Planck Institute for Biophysical Chemistry (Goettingen, Alemania); German Research School for Simulation Sciences, Aachen University (Alemania); Max Planck Institute for Bioinorganic Chemistry (Muelheim, Alemania); Department of Chemistry and Biochemistry (University of Miami at Ohio, USA), Department of Biochemistry, University of Frankfurt); Department of Chemistry (University of California, San Diego, USA); Department of Chemistry (University of Rochester, USA); Department of Biophysics (Medical School, Johns Hopkins University, USA); Department of Pharmacology (Western Case University, Cleveland, USA); Department of Chemistry (University of Arizona, Tucson, USA); Department of Chemistry and Biochemistry (University of Illinois at Urbana-Champaign, USA); Department of Pharmacology, Baylor College of Medicine (Texas, USA); Department of Chemistry (Northwestern University, USA). Department of Chemistry, University of Siena. Instituto de Tecnologia Química e Biológica (ITQB) Lisboa; Department of Chemistry, Wesleyan University (Middletown, Connecticut, USA); Center for Biomembrane Physics (Memphys) Odense, Denmark; Universidade Federal do Rio de Janeiro; Howard Hughes Medical Institute (HHMI) meetings, Australia, Estonia, Mexico, Janelia Farm, Lisbon; Instituto de Química (University of Sao Paulo, Brasil), Cornell University, Ithaca, USA; Department of Chemistry, University of Zurich; Department of Chemistry and Biochemistry, Worcester Polytechnic Institute; EMBL at Heidelberg; Dipartimento di Scienze Farmaceutiche (Universidad de Firenze, Italia); Institut de Microbiologie de la Méditerranée (Marseille, France).

SEMINARIOS ESPECIALES

1. José Gómez Ibáñez Lecturer, Departamento de Química, Wesleyan University (USA), 2008.
2. Primera Edición de los Seminarios Cardini, Fundación Instituto Leloir, 2013.
3. Frontiers in Biological Catalysis Sciences Speaker Series, Pacific Northwest National Laboratory (USA), 2014.

DISERTACIONES EN INNOVACIÓN

- “La curiosidad como motor de la economía”, Semana del Emprendedor, Rosario, Noviembre 2015.
- “Desafíos y oportunidades en biotecnología en el sector académico”, Foro De Innovación Gobierno de Santa Fe, MinCTIP y la Secretaría de Relaciones Internacionales, y la AHK Argentina, Santa Fe, Junio 2017.
- “La curiosidad como motor de la economía”, Foro de Innovación BCR, Rosario, Septiembre 2017.
- “Aceleradora Bio.r”, Foro de Capital para la Innovación, Región Litoral Centro, Panel con gestores de fondos de aceleradoras e inversores, Santa Fe, Noviembre 2017.

ORGANIZACIÓN DE ACTIVIDADES DE DIVULGACIÓN CIENTÍFICA

- Organizador de “Jornada de Capacitación en Biología Molecular” junto con la Red Argentina de Periodismo Científico (RAPC) 2012.
- Organizador de “Taller de Capacitación en Biotecnología y Biología Molecular para Comunicadores”, junto con la Dirección de Relaciones Institucionales (CONICET). 2013.

- Director y Organizador del “Curso de Biotecnología para Líderes de Opinión – BIOLIDERES”, IBR, mayo de 2013, septiembre 2014, mayo 2016 y mayo 2017.
- Organizador de la Primera Jornada de Puertas Abiertas a la Comunidad IBR, septiembre 2015, 2016, 2017.

CONFERENCIAS DE DIVULGACIÓN CIENTÍFICA

- Conferencia de divulgación científica Organizada por la Academia Nacional de Ciencias “Proteínas y Metales: algunas lecciones sobre la química de la vida” (Rosario, 2006).
- Conferencia de divulgación científica en la “Semana de la Química”, “Proteínas y Metales”, Universidad Nacional de Rosario, Facultad de Ciencias Bioquímicas y Farmacéuticas y la Asociación de Docentes Educadores en la Química de la República Argentina (filial Rosario) (2006-2010).
- Conferencia-Debate, organizada por DEFANTE & Cía. S.A., “La Neurobiología y la Gastronomía Molecular- Proteínas y la Química del Sabor”. Sala Auditorio Jorge Sábato, (Rosario, 2011)
- “Las proteínas y la química del sabor”, Conferencia de divulgación científica en la “Semana de la Química”, “Proteínas y Metales”, Universidad Nacional de Rosario, Facultad de Ciencias Bioquímicas y Farmacéuticas y la Asociación de Docentes Educadores en la Química de la República Argentina (filial Rosario, 2011, 2012,).
- “Gastronomía Molecular: las proteínas del sabor”, Encuentro Anual de la Red Argentina de Periodismo Científico. Instituto IBR, (Rosario, 2012).
- “La Biología Molecular y la vida íntima de las Proteínas”, Taller de Capacitación para divulgadores, CENPAT-CONICET (Puerto Madryn, 16 y 17 de agosto 2013).
- “Gastronomía Molecular y las proteínas del sabor”, Taller de Capacitación para divulgadores, CENPAT-CONICET (Puerto Madryn, 2013).
- “Las proteínas y la química del sabor”, Conferencia de divulgación científica en las VII Jornadas de Promoción y Divulgación de las Ciencias-Semana de la Química, Universidad Nacional de Rosario, Facultad de Ciencias Bioquímicas y Farmacéuticas (27 y 28 de agosto de 2013).
- “Descubriendo el mundo de la química”, Curso del programa de la Universidad Abierta para Adultos Mayores (UNR 2013).
- “3er Congreso Internacional de Comunicación Pública de la Ciencia”, Foro de discusión, Facultad de Ciencia Política y RR.II (UNR 2013).
- “La Biotecnología y las Moléculas de la vida”, Jornada de puertas abiertas a la comunidad. Instituto IBR, (Rosario, 2015).
- “Las super bacterias y la resistencia a los antibióticos”, TEDx Rosario (Teatro El Círculo, 2016).

ACTUACIÓN EN SOCIEDADES CIENTÍFICAS

- Vocal Suplente, Comisión Directiva de la Sociedad Argentina de Biofísica (SAB), 1994-97.
- Vocal Titular, Comisión Directiva (SAB), 1997-2006.
- Secretario, Comisión Directiva (SAB) 2009-2010.
- Council Member, Society of Biological Inorganic Chemistry, 2010-2013.
- Miembro del Consorcio internacional de RMN, WW-NMR. 2010.

PARTICIPACIÓN EN JURADOS, EVALUACIONES Y COMISIONES ASESORAS

- Miembro del Jurado de Evaluación para Becas de Iniciación a la Investigación e ingreso a carrera del Investigador, Consejo de Investigaciones de la UNR, 1994.
- Miembro del Jurado de Evaluación para el otorgamiento de Becas FOMEC, FCByF (UNR).
- Miembro de Jurado de Profesores Ordinarios (Universidad de Buenos Aires, Universidad Nacional de Córdoba, Universidad Nacional de La Plata).

- Jurado de Tesis Doctorales en Universidad Nacional de Rosario, Universidad Nacional del Litoral, Universidad de la Republica (Uruguay), Universidad de Queensland (Australia), CINVESTAV (México), Western Case University (USA) y Universidad de Buenos Aires.
- Jurado de Tesinas de Licenciatura, Universidad Nacional de Rosario, Universidad Nacional del Litoral.
- Miembro de la Comisión Tutorial, carrera de Licenciatura en Biotecnología, FCByF, UNR, 1995-1999.
- Miembro de la Comisión Académica del Doctorado en Ciencias Biológicas, FCByF, UNR, 1999-.
- Miembro de la Comisión Asesora de Ciencia y Técnica, FCByF, UNR, 1999-2000.
- Miembro de la Comisión Evaluadora de Subsidios para Viajes al Exterior, UNR (2000).
- Coordinador de la Comisión de Evaluación Externa, Secretaría de Investigación, Universidad de Quilmes, 2004, 2009.
- Miembro de Comisiones *ad-hoc* (CONICET).
- Miembro de la Comisión Asesora de Bioquímica, CONICET, 2006-2007.
- Miembro de la Comisión *ad-hoc* para la evaluación de las Convocatoria PICT 2003 y PME2005, ANPCyT (Argentina).
- Miembro de la Comisión del Premio L'Oréal-CONICET "La mujer en la ciencia", 2009.
- Miembro de la Comisión del Sistema Nacional de RMN, Ministerio de Ciencia y Tecnología, 2009-2014.
- Evaluador de subsidios para investigación científica de las siguientes instituciones: Universidad Nacional del Litoral, Universidad de Buenos Aires, ANPCyT, CONICET, Stanford Synchrotron Radiation Lightsource (USA), National Science Foundation (USA), FAPESP (Brasil), Israel-USA Binational Foundation, Food and Health Bureau of the Hong Kong Government; European Research Council (ERC); Aix-Marseille University (Francia); FINOVI Foundation (Francia).
- Miembro del Jurado de Evaluación de Profesores Adjuntos (Fac. Ciencias Químicas, UNC, Departamento de Química Biológica) 2012.
- Evaluador Externo, Instituto de Histología y Embriología "Dr. Mario H.Burgos" (IHEM) (UN Cuyo – CONICET), Mendoza, 2013.
- Miembro del Standing Committee of External Evaluators (SCEE), Italian Institute of Technology (IIT), Genova, Italia, 2014-.
- Miembro del Comité Científico del Acuerdo Argentina-EMBL, 2014-.
- Miembro de la Comisión Asesora de la Presidencia ANPCyT, 2014-2015.
- Miembro del Comité Evaluador del Proyecto Estratégico "Think Rio" convocado por el Estado de Rio de Janeiro a través de FAPERJ, 2014.
- Miembro del Comité Científico Internacional del Brazilian National Laboratory for Biosciences – LNBio, Campinas, SP, 2015.
- Revisor de trabajos científicos de las revistas (mas notorias) *Proc.Natl.Acad.Sci.USA*, *Nature Chemistry*, *Nature Chemical Biology*, *Nature Communications*, *Journal of the American Chemical Society*, *Angewandte Chemie*, *Journal of Biological Chemistry*, *Chemical Science*, *mBio*, *Chemical Society Reviews*, *ACS Infectious Diseases*, *Chemical Communications*, *Molecular Biology and Evolution*, *Journal of Proteome Research*, *Inorganic Chemistry*, *Biochemistry*, *Plos ONE*, *FEBS Journal*, *Antimicrobial Agents and Chemotherapy*, *Journal of Antimicrobial Chemotherapy*, *Metallomics*, *Biochemical Journal*, *Protein Science*, *Analytical Biochemistry*, *PROTEINS: Structure, Function, and Bioinformatics*, *Bioorganic & Medicinal Chemistry Letters*, *FEBS Letters*, *FEMS Letters*, *Organic & Biomolecular Chemistry*, *Biochimica et Biophysica Acta*, *Inorganica Chimica Acta*, *European Journal of Inorganic Chemistry*, *Journal of Inorganic Biochemistry*, *Journal of Biological Inorganic Chemistry*, *FEMS Microbiology Ecology*, *Journal of Enzyme Inhibition and Medicinal Chemistry*, *Bioinorganic Chemistry and Applications*.

SUBSIDIOS RECIBIDOS PARA TAREAS DE INVESTIGACIÓN *(en calidad de titular)*

1. Subsidio para la reinserción de becarios externos (Proyecto 12866/1 - 0021) **Institución otorgante:** Fundación Antorchas, junio 1993. **Tema:** Estudio espectroscópico de metaloenzimas y metaloproteínas paramagnéticas. **Monto:** \$5.600. Por concurso.
2. Subsidio para Proyecto de Investigación y Desarrollo (Subsidio 003-202/93-018). **Institución otorgante:** Universidad Nacional de Rosario, febrero 1994. **Tema:** Estudio de la relación estructura-función en metaloproteínas por Resonancia Magnética Nuclear. **Monto:** \$1.600. Por concurso.
3. Subsidio para Jóvenes Investigadores (Proyecto A-13015/1 - 00074) **Institución otorgante:** Fundación Antorchas, abril 1994. **Tema:** Estudio de la relación estructura-función en proteínas azules de cobre por Resonancia Magnética Nuclear y sustitución metálica. **Monto:** \$7.000. Por concurso.
4. Subsidio para pasaje para realizar una estadía de investigación en Italia en Biofísica y asistir a congresos científicos (Proyecto A-13019/1 - 003188). **Institución otorgante:** Fundación Antorchas, junio de 1994. **Monto:** \$1.000. Por concurso.
5. TWAS Research Grant (No. 93-436 RG/CHE/LA) **Institución otorgante:** Third World Academy of Sciences (TWAS), Trieste (Italia), septiembre 1994. **Tema:** Structure-function relationship in blue copper proteins studied by Nuclear Magnetic Resonance and metal substitution. **Monto:** \$4.000. Por concurso.
6. Subsidio para Jóvenes Investigadores. (Proyecto A-13218/1 - 000092) **Institución otorgante:** Fundación Antorchas, abril 1995. **Tema:** Estudio de la relación estructura-función en proteínas azules de cobre por sustitución metálica y espectroscopía. **Monto:** \$7.000. Por concurso.
7. Subsidio para Investigación (Proyecto A-13359/1-000123) **Institución otorgante:** Fundación Antorchas, abril 1996. **Tema:** Estudios espectroscópicos de la relación estructura-función en metaloproteínas. **Monto:** \$7.000. Por concurso.
8. ACS Travel Grant. **Institución otorgante:** American Chemical Society, octubre 1996. **Tema:** Paramagnetic NMR of Blue Copper Proteins. **Monto:** \$2.500. Por concurso.
9. Subsidio para Proyecto de Investigación y Desarrollo. **Institución otorgante:** Universidad Nacional de Rosario, 1996. **Tema:** Estudio de la relación estructura-función en metaloproteínas por Resonancia Magnética Nuclear. **Monto:** \$808. Por concurso.
10. Subsidio para Proyecto de Investigación Anual (PMT-PICT 0507). **Institución otorgante:** evaluado por CONICET (concurso 1996), financiado por la Agencia Nacional de Promoción Científica y Tecnológica, junio de 1997. **Tema:** Estudio de la relación estructura-función en la enzima de zinc β -lactamasa II. **Monto:** \$8.400. Por concurso.
11. Subsidio para Proyecto de Investigación y Desarrollo. **Institución otorgante:** Universidad Nacional de Rosario, 1997. **Tema:** Estudio de la relación estructura-función en la enzima de zinc β -lactamasa II. **Monto:** \$550. Por concurso.
12. Subsidio de Inicio de carrera (A-13532/1 -105). **Institución otorgante:** Fundación Antorchas, 1998-2000. **Tema:** Estudio de la relación estructura-función en la enzima de zinc β -lactamasa II. **Monto:** \$ 75.000. Por concurso.
13. Subsidio para Proyecto de Investigación (PICT97 01-00190). **Institución otorgante:** Agencia Nacional de Promoción Científica y Tecnológica, 1998-99. **Tema:** Estudio de la relación estructura-función en la enzima de zinc β -lactamasa II. **Monto:** \$ 32.800. Por concurso.
14. Subsidio para Proyecto de Investigación y Desarrollo. **Institución otorgante:** Universidad Nacional de Rosario, 1998. **Tema:** Estudio de la relación estructura-función en la enzima de zinc β -lactamasa II. **Monto:** \$1000. Por concurso.
15. Fogarty International Center Award (FIRCA 1 R03 TW000985-01). **Institución otorgante:** National Institutes of Health (NIH), 1998-2001. **Tema:** Paramagnetic NMR of Electron Transfer Copper Proteins. **Monto:** U\$S 67.028. Por concurso.

16. Proyecto de Investigación Plurianual (PIP 0582). **Institución otorgante:** CONICET, 1999-2001. **Tema:** Estructura-función en una metalo- β -lactamasa. **Monto:** \$ 15.660 (1999). Por concurso.
17. Subsidio para compra de equipamiento científico. **Institución otorgante:** Fundación Antorchas, 2001. **Tema:** Fondos parciales para compra de un equipo de stopped-flow. **Monto:** U\$S 15.000 (2001).
18. Subsidio para Proyecto de Investigación (PICT99-01-06616). **Institución otorgante:** Agencia Nacional de Promoción Científica y Tecnológica, 2000-2003. **Tema:** Aspectos moleculares de la evolución de la resistencia bacteriana a antibióticos mediante metalo- β -lactamasas. **Monto:** \$ 150.000. Por concurso.
19. Beca "Carrillo-Oñativia". **Institución otorgante:** Ministerio de Salud, 2001-2002. **Tema:** Aspectos moleculares de la evolución de la resistencia bacteriana a antibióticos mediante metalo- β -lactamasas. **Monto:** \$ 28.000. Por concurso.
20. International Research Scholarship (2002-2006). **Institución otorgante:** Howard Hughes Medical Institute. **Tema:** Molecular Basis for the Evolution of Bacterial Resistance to Antibiotics mediated through metallo-beta-lactamases. **Monto:** U\$S 266.666. Por concurso.
21. Subsidio para Proyecto de Investigación (PICT2002-01-11625). **Institución otorgante:** Agencia Nacional de Promoción Científica y Tecnológica, 2004-2007. **Tema:** Estudio espectroscópico de sitios de cobre en sitios de transferencia electrónica en citocromo oxidasas. **Monto:** \$ 203.083. Por concurso.
22. Subsidio para la compra de un espectrómetro de RMN de 600 MHz (PME2003-0026). **Institución otorgante:** Agencia Nacional de Promoción Científica y Tecnológica, 2004. **Monto:** \$ 1.800.000. Por concurso.
23. R01 – Research Grant (2005-2007). **Institución otorgante:** National Institutes of Health, USA, 2005. **Tema:** Paramagnetic NMR of Electron Transfer Copper Proteins. **Monto:** U\$S 324.000. Por concurso.
24. Subsidio para Proyecto de Investigación (PICT 2004-01-25502). **Institución otorgante:** Agencia Nacional de Promoción Científica y Tecnológica. **Tema:** Diversidad estructural y mecanística de metalo-beta-lactamasas y sus implicancias en la resistencia a antibióticos **Monto :** \$ 279.271. Por concurso.
25. International Research Scholarship (2007-2011). **Institución otorgante:** Howard Hughes Medical Institute. **Tema:** Molecular Basis for the Evolution of Bacterial Resistance to Antibiotics mediated through metallo-beta-lactamases. **Monto:** U\$S 487.000. Por concurso.
26. Subsidio para Proyecto de Investigación (PICT-2007-00314). **Institución otorgante:** Agencia Nacional de Promoción Científica y Tecnológica. **Tema:** Estructura y dinámica de complejos interproteicos redox de hemo-cobre. **Monto:** \$ 298991.68 (beca incluida). Por concurso.
27. Fellowship, John Simon Guggenheim Foundation (2009). **Monto:** U\$S 27.000. Por concurso.
28. Subsidio para Proyecto de Investigación (PICT-2008-0405). **Institución otorgante:** Agencia Nacional de Promoción Científica y Tecnológica. **Tema:** Mecanismo catalítico y reconocimiento de sustrato en metalo-beta-lactamasas y su impacto en la resistencia a antibióticos. **Monto:** \$ 250.000 (beca incluida) Por concurso.
29. R01AI100560-01- Research Grant (2012-2017). **Institución otorgante:** **National Institutes of Health**, National Institute of Allergy and Infectious Diseases (NIAD) **Tema:** A Mechanism-Based Approach to Metallo-beta-Lactamase Inhibition. **Monto:** \$ 2.130.040. USD 671.250.-
30. Subsidio para proyecto de investigación en Áreas científicas consolidadas internacionalmente (PICT-2011-1977). **Institución otorgante:** Agencia Nacional de

- Promoción Científica y Tecnológica. **Tema** “Flexibilidad conformacional en la evolución de proteínas”. **Monto:** \$ 1.187.000 (2012-2016).
31. Plataforma Tecnológica (Concurso PPL-2) **Institución otorgante:** Agencia Nacional de Promoción Científica y Tecnológica. **Tema** “Plataforma Tecnológica de Biología Estructural y Metabolómica”. **Monto:** \$ 7.992.984. En carácter de Responsable Administrativo del Proyecto. (2012-2016)
 32. Subsidio para Proyecto de Investigación (PICT-2012-1285). **Institución otorgante:** Agencia Nacional de Promoción Científica y Tecnológica. **Tema:** Estudio Bioquímico y Estructural del Mecanismo de Inserción de Cobre en Oxidasas Mitocondriales **Monto:** \$ 343.200 (beca incluida) Por concurso.
 33. Subsidio para Proyecto de Investigación (PICT-2015-0974). **Institución otorgante:** Agencia Nacional de Promoción Científica y Tecnológica. **Tema:** Diseño de inhibidores de la Beta-Lactamasa NDM-1 en base al mecanismo y a determinantes estructurales del perfil de sustrato. **Monto:** \$ 777.263. Por concurso.
 34. Subsidio para Proyecto de Investigación (PICT-2016-1657). **Institución otorgante:** Agencia Nacional de Promoción Científica y Tecnológica. **Tema:** Mecanismos de estabilización de Metallo-beta-lactamasas en el periplasma bacteriano y su impacto en la resistencia a antibióticos. **Monto:** \$ 850.500. Por concurso.
 35. **SNSF**
 36. **ITALIA**
 37. **ECOS**

DICTADO DE CURSOS DE POST-GRADO

- Análisis espectroscópico, Facultad de Ciencias Bioquímicas y Farmacéuticas (FCByF), UNR, 1989. *Docente.*
- Introducción al cálculo de Orbitales Moleculares, FCByF, UNR, 1989. *Docente.*
- Química de Coordinación I, FCByF, UNR, 1989. *Docente.*
- Química de Coordinación II, FCByF, UNR, 1990. *Docente.*
- Tópicos de Química Inorgánica, FCByF, UNR, 1990. *Docente.*
- Aplicación de la teoría de grupos en química, FCByF, UNR, 1990. *Docente.*
- Espectroscopía - Actualización en técnicas de 2D, FCByF, UNR, 1993. *Docente.*
- Introducción a la mecánica cuántica para químicos, FCByF, UNR, 1994. *Docente.*
- Técnicas avanzadas de Resonancia Magnética Nuclear, FCByF, UNR, 1994. *Docente.*
- Fenómenos de Relajación en Resonancia Magnética, FCByF, UNR, 1995. *Docente y Coordinador.*
- Curso Internacional: “Aplicaciones de la Resonancia Magnética (NMR-EPR) a Sistemas Biológicos”, Facultad de Farmacia y Bioquímica, UBA, 1997, *Docente y Director.*
- Métodos para el estudio conformacional de proteínas, Facultad de Farmacia y Bioquímica, UBA, 1995, 1997-2005. *Docente invitado.*
- Química Biológica Superior, Instituto de Investigaciones Bioquímicas Luis F. Leloir (UBA), 2000-2003. *Docente invitado.*
- Química y estructura de péptidos y proteínas: Las bases de la proteómica, UBA-Universidad de San Martín, 2001-2006. *Docente invitado.*
- International Course “NMR as a tool for protein structure determination” (Rio de Janeiro, Brasil, 2004). *Docente invitado.*
- International Course “Molecular Basis of Bacterial Stress Response” (Rosario, 2004 financiado por HHMI). *Docente y organizador.*

- Espectroscopía de biomoléculas, FCByF, UNR, 1995-2008. *Docente y Director*. Este curso se dicta anualmente, y es parte de la curricula de los Doctorados en Ciencias Químicas y en Ciencias Biológicas (Categoría A CONEAU).
- Curso Práctico de RMN: “Estrategias de asignación de proteínas en solución mediante espectroscopía de Resonancia Magnética Nuclear” (RMN), Rosario, Argentina, 2007. Montevideo, Uruguay, 2010. *Docente y Director*.
- Curso Internacional EMBO “Structure and dynamics of biomolecules by NMR spectroscopy”, Rosario, Argentina, 2009. *Organizador y docente*.
- Curso de Posgrado “Espectroscopía de RMN de biomoléculas”, FCByF, UNR, 2010, 2012. *Docente*. Este curso se dicta anualmente, y es parte de la curricula de los Doctorados en Ciencias Químicas y en Ciencias Biológicas (Categoría A CONEAU).