

## **CURRICULUM VITÆ** **Alejandro J. Vila**

Instituto de Biología Molecular y Celular de Rosario (IBR, CONICET-UNR), Rosario, Ocampo y Esmeralda, Predio CONICET Rosario, 2000 ROSARIO, Argentina  
E-mail: [vila@ibr-conicet.gov.ar](mailto:vila@ibr-conicet.gov.ar)



### **DATOS PERSONALES**

Identificación: VILA, Alejandro José

Fecha de Nacimiento: 11 de mayo de 1962

Dirección residencial: Mitre 1258 – Dto. 2- 2000 ROSARIO

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

### **CARGOS ACTUALES**

- Investigador Superior (CONICET). Lugar de trabajo: Instituto de Biología Molecular y Celular de Rosario (IBR-CONICET-UNR)
- Profesor Titular de Biofísica (concurado), 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 Metabolómica (PLABEM).
- Director Científico, Incubadora UNR.

### **BREVE NARRATIVA DE SU TRAYECTORIA CIENTÍFICA**

Alejandro Vila estudia el papel de los metales en biología mediante el análisis de la estructura y función de metaloproteínas con el propósito de correlacionar las propiedades in vitro con su comportamiento en su contexto biológico, mediante una mirada integral. **Vila fue pionero en la aplicación de la Resonancia Magnética Nuclear (RMN) en bioquímica en el país, jugando un rol fundamental en el desarrollo de la biología estructural.**

Estudió la relación estructura-función en proteínas de cobre de transferencia electrónica, y dilucidó los mecanismos de transporte de cobre en bacterias y mamíferos, siendo referente internacional en este campo.

**Vila es referente mundial en el campo de la resistencia antimicrobiana mediada por metallo- $\beta$ -lactamasas (MBLs).** Su grupo describió los determinantes estructurales de la función de las MBLs y su impacto en la resistencia a antibióticos. Mediante la elucidación de su mecanismo catalítico, demostró que estas enzimas comparten un mecanismo de reacción común, a pesar de su diversidad estructural. En base a este hallazgo, Vila diseñó inhibidores capaces de restaurar la eficacia de los antibióticos frente a aislados clínicos productores de MBLs, que se encuentran en fase de ensayos preclínicos.

Recientemente abordó el estudio de la fisiología celular y evolución de las  $\beta$ -lactamasas. Descubrió que las MBLs son degradadas en el periplasma bacteriano en respuesta a la limitación de metal inducida por el sistema inmune. En 2016 halló que NDM-1, la metalo- $\beta$ -lactamasa de mayor y más amplio impacto clínico, es una proteína anclada a membrana, lo que le permite resistir la limitación de metal, revelando que ésta ejerce presión de selección en la evolución de estas enzimas. Esta localización también permite la transferencia de proteínas entre microorganismos mediante vesículas extracelulares, lo que representa un nuevo paradigma en la diseminación de la resistencia a los antibióticos que involucra el transporte de proteínas

asociado a la transferencia de material genético. Su grupo reveló los determinantes proteicos de la especificidad de hospedador bacteriano de las MBLs. En colaboración con el Instituto Malbrán, estos descubrimientos se han traducido en el desarrollo de ensayos de detección de resistencia.

**En síntesis, su carrera ha abarcado el estudio estructural, funcional, y fisiológico de las metalo- $\beta$ -lactamasas en bacterias, contribuyendo a la comprensión de estos determinantes de resistencia y permitiendo mejores opciones terapéuticas.**

Ha publicado más de 160 artículos originales en revistas de alto impacto interdisciplinarias y en el campo de la bioquímica, química, biología estructural, evolución y microbiología (*Nature Chemical Biology, Nature Comm., PNAS, EMBO J., J.Am.Chem.Soc., Angewandte Chemie, Chemical Science, Molecular Biology and Evolution, mBio*) y artículos de revisión (*Chemical Reviews, Lancet ID, Accounts of Chemical Research, Trends in Microbiology*).

Es revisor de revistas científicas del más alto nivel. Forma y ha formado parte del Comité Editorial de numerosas revistas científicas internacionales. En la actualidad es miembro del Comité Editorial de Antimicrobial Agents and Chemotherapy (ASM), ACS Organic and Inorganic Au (ACS), Journal of Biological Chemistry (ASBMB) y mBio (ASM). Fue Editor de una edición del Journal of Magnetic Resonance Open sobre "Magnetic Resonance in Latin America".

Fue invitado a dictar más de 130 conferencias (incluyendo Keynote and Plenary Lectures) en los congresos más importantes del estudio de la resistencia antimicrobiana (Interscience Conference on Antimicrobial Agents and Chemotherapy, European Congress of Clinical Microbiology & Infectious Diseases, ID Week), de la química biológica Inorgánica (International Conference on Biological Inorganic Chemistry, European Conference on Biological Inorganic Chemistry, Latin American Conference on Biological Inorganic Chemistry), la RMN en biología (International Society of Magnetic Resonance, International Conference on Magnetic Resonance in Biological Systems), en la química de proteínas (American Chemical Society, Protein Society, Biophysical Society). Fue También invitado a diversas Gordon Conferences (Metals in Biology, Cell Biology of Metals, Microbial Population Biology y Drug Resistance).

Recibió numerosos subsidios de organismos nacionales y extranjeros, como la Third World Academy of Sciences, el Howard Hughes Medical Institute, la American Chemical Society, la Swiss National Foundation y los National Institutes of Health de Estados Unidos. Ha sido titular (PI) de cuatro subsidios de NIH, uno de ellos en curso. Recibió numerosas distinciones internacionales y organizó varios congresos internacionales. Fue evaluador de subsidios de agencias internacionales y evaluador externo de instituciones extranjeras.

Durante toda su carrera demostró un fuerte compromiso con la popularización de la ciencia, dictando charlas en escuelas primarias y secundarias, instituciones empresarias y ONGs, habiendo dado dos charlas TEDx, una experiencia TEDx y participado como actor en la película "Fixon" producida por TEDx Rosario.

En su gestión como director del IBR (2011-2020), creó y organizó el curso Biolideres (Biotecnología para Lideres de Opinión), que se desarrolla anualmente desde 2013 y pretende acercar a funcionarios, empresarios y comunicadores al mundo científico y de la economía del conocimiento mediante un taller de entrenamiento práctico en el laboratorio (<https://www.ibr-conicet.gov.ar/ibr-en-la-comunidad/biolideres/>). Este esfuerzo ha impulsado la creación de la Agencia Santafesina de Ciencia, Tecnología e Innovación (ASACTel), y la aprobación de la Ley Provincial de Financiamiento de Ciencia y Tecnología en la Provincia de Santa Fe.

Su trayectoria de gestión lo ha llevado a impulsar la transferencia de conocimiento en el sector científico mediante la creación de la Aceleradora de proyectos Biotecnológicos Bio.r, y posteriormente participando como Director Científico de la Incubadora de Biotecnología de la Universidad Nacional de Rosario.



## 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.

### ANTECEDENTES EN INVESTIGACIÓN Y DOCENCIA

#### DOCENCIA EN UNIVERSIDAD NACIONAL DE ROSARIO

- 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 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.
- Director del curso internacional: "Understanding Pulse Sequences in Modern Protein NMR", Rosario, Argentina, 2006.
- Organizador del Curso Práctico de RMN: "Estrategias de asignación de proteínas en solución mediante espectroscopía de Resonancia Magnética Nuclear" (RMN), Rosario, Argentina, 2007.
- Docente regular de la materia y curso de posgrado "Espectroscopia de RMN de Macromoléculas Biológicas", desde 2014.
- Docente regular de la materia y curso de posgrado "Bioquímica y biofísica de proteínas de membrana", desde 2018.
- Organizador y docente del Curso Internacional EMBO "Structure and dynamics of biomolecules by NMR spectroscopy", Rosario, Argentina, 2009.
- Organizador y docente del curso internacional CeBEM-ERIC "Advanced Practical Course on In-Cell NMR & Symposium on Protein Post-translational", 2018.

#### PROFESOR INVITADO EN OTRAS UNIDADES ACADÉMICAS

- Docente invitado de cursos de posgrados acreditados en Universidad de Buenos Aires, Universidad Nacional de San Martín, Universidad Nacional de Córdoba, Universidad Nacional del Litoral y Universidad Nacional de Tucumán.
- Director, "International Course of Applications of Magnetic Resonance to Biological Systems", 1997 (Curso satélite del Congreso Iberoamericano de Biofísica) 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 invitado, 3rd Latin American NMR School, Bogotá, Colombia (2012)
- Profesor Invitado, Universidad de Modena-Emilia Romagna, Italia (a concretarse en 2024).

## 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- $\alpha$ -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 Científico, Incubadora UNR, 2021-.
- Director concursado, Instituto de Biología Molecular y Celular de Rosario (IBR, CONICET-UNR) 2015-2020.
- Director concursado, Instituto de Biología Molecular y Celular de Rosario (IBR, CONICET-UNR) 2011-2015.
- Director Científico, Aceleradora de proyectos Biotecnológicos *Bio.r* (CONICET), 2016-2020.
- Coordinador del Consejo Asesor del Sistema Nacional de Resonancia Magnética (MinCyT), 2020-.
- Miembro del Consejo Asesor del Sistema Nacional de Resonancia Magnética (MinCyT), 2008-2019.
- Director de la Plataforma de Biología Estructural y Metabólica (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.
- Vocal, Fundación IBR, 2020-.
- Vice-presidente, Fundación IBR, 2011-2020.
- Secretario, Fundación IBR, 2008-2010.
- 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 Físicoquímica 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 ““Studioli 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 Físicoquímica 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.
- E.P.Abraham Award, 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, por las contribuciones al conocimiento de los mecanismos químicos del cobre en biología y bioquímica, 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.
- Académico Fundador, Academia Santafesina de Ciencias Médicas, desde 2017.
- Distinción por la contribución a la ciencia, Fundación Ciencias Médicas de Rosario, 2018.
- Premio “Bernardo Houssay”, CEDIQUIFA, 2018.
- Académico Correspondiente, Academia Nacional de Ciencias Exactas, Físicas y Naturales, desde 2019.
- Académico, Academia Nacional de Ciencias, desde 2021.
- Fellow, American Academy of Microbiology, desde 2023.
- Diploma al Mérito en Bioquímica y Biología Molecular, Fundación Konex, 2023.

## **PARTICIPACIÓN EN COMITÉS EDITORIALES DE REVISTAS**

- Miembro del Editorial Board, *mBio*, 2023-2028.
- Miembro del Editorial Board, *Journal of Biological Chemistry*, 2023-2028.
- Guest Editor, *Journal of Magnetic Resonance Open*, Special Issue on “Magnetic Resonance in Latin America”, 2023.
- Miembro del Editorial Board, *ACS Organic and Inorganic Au*, 2021-2023.
- Miembro del Editorial Board, *Antimicrobial Agents and Chemotherapy*, 2019-2024.
- Miembro del Editorial Board, *Accounts of Chemical Research*, 2006- 2015.
- Miembro del Editorial Board, *Journal of Inorganic Biochemistry*, 2003-2010.
- Miembro del Editorial Advisory Board, *European Journal of Inorganic Chemistry*, 2000-2006.
- Miembro del Editorial Advisory Board, *Journal of Biological Inorganic Chemistry*, 1998-2001.

## **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 Independiente de CONICET.
3. Bioq. Adriana Ortolani (UNL), Beca FOMECE, 1998. Actualmente es Profesora en UNL y Decana de la Facultad de Bioquímica y Ciencias Biológicas (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. Actualmente es Investigador Adjunto de CONICET.
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 Llases, Beca doctoral (ANPCyT), 2014-2017.
28. Lic. Estefanía Giannini, Beca doctoral (CONICET), 2015-2019.
29. Lic. Ma. 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. Ma. Carolina López, Beca posdoctoral (ANPCyT) 2017-2019.
33. Dra. Antonela Palacios, Beca postdoctoral (CONICET), 2018-2020.
34. Dr. Guillermo Bahr, Beca postdoctoral (CONICET), 2018-2020.
35. Lic. Gina Dotta, Beca doctoral (CONICET), 2019-2023.
36. Lic. Matias Carnevale, Beca doctoral (ANPCyT), 2019-2022.
37. Lic. Clarisa Parodi, Beca doctoral (CONICET), 2020-2024.
38. Lic. Brenda Warecki, Beca doctoral (ANPCyT), 2023-2025.



#### 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  $\beta$ -lactamasa". **Calificación:** Sobresaliente.
3. Lic. Rodolfo M. Rasia, 1999. **Título:** "Regulación de la función del sitio activo de la enzima  $\beta$ -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  $\beta$ -lactamasa metálica". **Calificación:** Sobresaliente.
6. Lic. Javier González, 2003. **Título:** "Construcción de metaloenzimas quiméricas mediante reingeniería del sitio activo de la metalo- $\beta$ -lactamasa de *Bacillus cereus*". **Calificación:** Sobresaliente.
7. Lic. Luciano Abriata, 2004. **Título:** "Ingeniería de la red de puentes hidrógeno del sitio activo de enzima  $\beta$ -lactamasa II de *Bacillus cereus*". **Calificación:** Sobresaliente.
8. Lic. Lisandro González, 2006. **Título:** "Una mirada al sitio Zn<sup>2</sup> de la metalo- $\beta$ -lactamasa de *Bacillus cereus*". **Calificación:** Sobresaliente.
9. Lic. María Eugenia Zaballa, 2008. **Título:** "Estudio de la interacción de metalo- $\beta$ -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- $\beta$ -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<sub>A</sub> en Citocromo c Oxidasa". **Calificación:** Sobresaliente.
12. Andrés Espinoza Cara, 2011. **Título:** "Estudio del mecanismo de ensamblado del sitio Cu<sub>A</sub> 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- $\beta$ -Lactamasa VIM-2". **Calificación:** Sobresaliente.
15. Estefanía Giannini, 2014. **Título:** "Estudio de la función de residuos de segunda esfera de coordinación de la metalo- $\beta$ -lactamasa NDM-1". **Calificación:** Sobresaliente.
16. Luisina Vitor-Horen, 2016. **Título:** "Estudio de la evolución natural de la Metalo- $\beta$ -Lactamasa NDM-1". **Calificación:** Sobresaliente.
17. Juan Pablo Rebecchi, 2018. **Título:** "Diseño y caracterización de proteínas mutantes de cobre con nuevas funcionalidades". **Calificación:** Sobresaliente.

#### DIRECCIÓN DE TESIS DOCTORALES (FINALIZADAS)

1. Dra. Julia A. Cricco (2002). Doctor, Facultad de Ciencias Bioquímicas y Farmacéuticas (UNR). **Tema:** "Estudio del rol de un residuo de cisteína en la estructura y función de metalo- $\beta$ -lactamasas". **Calificación:** Sobresaliente. Actualmente es Investigador Independiente de CONICET, Directora de Grupo en IBR, Profesor Adjunto en la UNR y Coordinadora del Área Ciencia y Tecnología de la UNR.
2. Dr. Matteo dal Peraro (2004). PhD, SISSA (Trieste). **Tema:** "Metallo- $\beta$ -lactamasas: substrate binding and catalytic mechanism". **Calificación:** *Summa cum laudae*. Codirector de la tesis (Director: Dr. Paolo Carloni). Actualmente es Associate Professor 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- $\beta$ -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, Profesor Asociado en la UNR y Director de Grupo en IBR.
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- $\beta$ -lactamasa BclI de *Bacillus cereus*”. **Calificación:** Sobresaliente. Premio a la Mejor Tesis en Biofísica (Sociedad Argentina de Biofísica). Actualmente es Investigador Independiente de CONICET, Profesor Adjunto en UNR y Directora de Grupo en IBR.
  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- $\beta$ -lactamasa”. **Calificación:** Sobresaliente. Actualmente es Investigador Adjunto de CONICET y Directora de Grupo en CEFODI.
  6. Dr. Pablo E. Tomatis (2008). Doctor en Ciencias Biológicas, Facultad de Ciencias Bioquímicas y Farmacéuticas (UNR). **Tema:** “Evolución molecular dirigida de metalo- $\beta$ -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- $\beta$ -lactamasa de *Bacillus cereus*”. **Calificación:** Sobresaliente. Actualmente es Investigador Independiente de CONICET y Director del Laboratorio de Enzimología Estructural en INBIONATEC (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 Senior Scientist, Lab for Biomol Modeling / Protein Structure Facility, EPFL (Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne)..
  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- $\beta$ -lactamasa GOB-18 de *Elizabethkingia meningoseptica*”. **Calificación:** Sobresaliente. Actualmente es Investigador Adjunta de CONICET, Directora de Grupo en IBR y Coordinadora del Centro de Biología Estructural del Mercosur (CeBEM).
  10. Lic. Lisandro González (2012). Doctor en Ciencias Biológicas, Facultad de Ciencias Bioquímicas y Farmacéuticas (UNR). **Tema:** “Estudio del rol de metalo- $\beta$ -lactamasas endógenas y adquiridas en la resistencia bacteriana contra antibióticos  $\beta$ -lactámicos”. **Calificación:** Sobresaliente. Actualmente es Investigador Adjunto 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 investigadora en el Hôpitalux Universitaire de Genève.
  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  $\beta$ -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 Investigadora Adjunta de CONICET en IPROBYQ.
  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 trabaja en CIBIC.
  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 trabaja en Terragene.
15. Lic. Antonela Palacios, (2018). Doctora en Ciencias Biológicas, Facultad de Ciencias Bioquímicas y Farmacéuticas (UNR). **Tema:** “Estudio del Mecanismo de Reacción y Reconocimiento de Sustrato de la Metallo-β-Lactamasa NDM-1”. **Calificación:** Sobresaliente. Actualmente trabaja en Terragene.
  16. Lic. Guillermo Bahr, (2018). Doctor en Ciencias Biológicas, Facultad de Ciencias Bioquímicas y Farmacéuticas (UNR). **Tema:** “Estudio de la metalo-beta-lactamasa anclada a membrana NDM-1 y análisis de su evolución clínica”. **Calificación:** Sobresaliente. Actualmente trabaja en Terragene.
  17. Lic. Alcides Leguto, (2018). Doctor en Ciencias Químicas, Facultad de Ciencias Bioquímicas y Farmacéuticas (UNR). **Tema:** “Rol de la flexibilidad de proteínas en su adaptabilidad funcional”. **Calificación:** Sobresaliente. Actualmente es Profesor Titular en UNR.
  18. Lic. Estefanía Giannini, (2019). Doctora en Ciencias Biológicas, Facultad de Ciencias Bioquímicas y Farmacéuticas (UNR). **Tema:** “Estudio bioquímico y estructural de la metalo beta lactamsas NDM-1: residuos de segunda esfera e implicancias de su anclaje a membrana”. **Calificación:** Sobresaliente. Actualmente es becaria postdoctoral en Macquire University (Australia).
  19. Lic. María Eugenia Llases, (2020). Doctora en Ciencias Biológicas, Facultad de Ciencias Bioquímicas y Farmacéuticas (UNR). **Tema:** “Estudio bioquímico y estructural de las proteínas mitocondriales HCC1 y HCC2 de *A.thaliana*”. **Calificación:** Sobresaliente. Premio a la mejor Tesis (Fundación IBR 2019-2020). Actualmente es becaria postdoctoral en Harvard Medical School.
  20. Lic. Agustina Rossi (2021). Doctora en Ciencias Biológicas, Facultad de Ciencias Bioquímicas y Farmacéuticas (UNR). **Tema:** “β-lactamasas: Abordaje de su evolución clínica y desarrollo de inhibidores”. **Calificación:** Sobresaliente. Actualmente es becaria postdoctoral en University of Massachusetts.
  21. Lic. Juliana Delmonti (2023), Facultad de Ciencias Bioquímicas y Farmacéuticas (UNR). **Tema:** "Estudio de la evolución natural de la carbapenemasa NDM y su impacto clínico". **Calificación:** Sobresaliente. Actualmente trabaja en Macrogen, Holanda.

#### **DIRECCIÓN DE TESIS DOCTORALES (EN CURSO)**

22. 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”.
23. Lic. Gina Dotta, tesis en curso Facultad de Ciencias Bioquímicas y Farmacéuticas (UNR). **Tema:** “Estudio de la evolución clínica de la beta lactamasa AmpC en una cepa hipermutadora de *Pseudomonas aeruginosa*”.
24. Lic. Matías Carnevale, tesis en curso. Facultad de Ciencias Bioquímicas y Farmacéuticas (UNR).
25. Lic. Clarisa Parodi, tesis en curso Facultad de Ciencias Bioquímicas y Farmacéuticas (UNR). **Tema:** "Estudio del impacto de la limitación de Zn(II) en *Acinetobacter baumannii* en procesos de expresión y secreción a vesículas de Metallo-β-lactamasas"
26. Lic. Lucía Capodimonte, tesis en curso. Facultad de Ciencias Bioquímicas y Farmacéuticas (UNR).
27. Lic. Brenda Warecki, tesis en curso. Facultad de Ciencias Bioquímicas y Farmacéuticas (UNR).

#### **DIRECCIÓN DE INVESTIGADORES**

- Director del Dr. Claudio Fernández, Investigador Asistente (CONICET), 1997-2002. Actualmente es Investigador Principal de CONICET y Profesor Titular en la UNR.

- Director de la Dra. Julia Cricco, Investigador Asistente (CONICET), 2006-2012. Actualmente es Investigador Independiente de CONICET y Profesor Adjunto en la UNR.
- 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), 2016-2022. Actualmente es Investigador Adjunto de CONICET.
- Director de la Dra. María Carolina López, Investigador Asistente (CONICET), 2023-.

## 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 8000 citas, ***h-index***: 51 (Google Scholar) (Junio 2023).

### ARTÍCULOS ORIGINALES MAS DESTACADOS

1. L.J. González, G. Bahr, M.M. González, R.A. Bonomo and **A.J. Vila** “*In-cell* kinetic stability is an essential trait in metallo  $\beta$ -lactamase evolution”, *Nature Chemical Biology*, en prensa (2023) doi: 10.1038/s41589-023-01319-0. **Highlighted in Nature Briefings.**
2. C. López, J. A. Ayala, R. A. Bonomo, L. J. González and **A.J. Vila** “Protein determinants of dissemination and host specificity of Metallo- $\beta$ -lactamases”, *Nature Communications*, 10(1):3617. 10.1038/s41467-019-11615-w (2019).
3. 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- $\beta$ -lactamases”, *Nature Communications*, **8**, 538 (2017).
4. 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- $\beta$ -lactamase inhibition by bisthiazolidines reveals multiple binding modes”, *Proc.Natl.Acad.Sci USA*, **111**, E3745-54 (2016). \*Autores corresponsales.
5. 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).
6. 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<sub>A</sub> in human cytochrome oxidase”, *Proc.Natl.Acad.Sci USA*, **112**, 11771-6 (2015).
7. 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).
8. J.M.González, M.R.Meini, P.E.Tomatis, F.J.Medrano, J.A.Cricco and **A.J.Vila** “Metallo- $\beta$ -lactamases withstand low Zn(II) conditions by tuning metal-ligand interactions”, *Nature Chemical Biology*, **8**, 698-700 (2012). **Highlighted in Faculty of 1000.**
9. P.E.Tomatis, R.M. Rasia, L.Segovia and **A.J.Vila** “Mimicking natural evolution in metallo- $\beta$ -lactamases through second-shell ligand mutations”, *Proc.Natl.Acad.Sci.USA*, **102**, 13761-13766 (2005). **Highlighted in the cover.**
10. 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*  $\beta$ -lactamase II”, *Biochemistry*, **37**, 10173-80 (1998).

### ARTÍCULOS ORIGINALES Y TRABAJOS DE REVISIÓN EN REVISTAS

Publicó 163 artículos originales en revistas internacionales, habiendo sido citado más de 8000 veces, con un índice *h* de 51 (Google Scholar). Se indican los 10 más relevantes.

163. L.J. González, G. Bahr, M.M. González, R.A. Bonomo and **A.J. Vila** “*In-cell* kinetic stability is an essential trait in metallo  $\beta$ -lactamase evolution”, *Nature Chemical Biology*, en prensa (2023), doi: 10.1038/s41589-023-01319-0.
162. Yasmin M, Rojas LJ, Marshall SH, Hujer AM, Cmolik A, Marshall E, Boucher HW, **Vila AJ**, Soldevila M, Diene SM, Rolain JM, Bonomo RA “Characterization of a Novel Pathogen in Immunocompromised Patients: Elizabethkingia anophelis-Exploring the Scope of Resistance to Contemporary Antimicrobial Agents and  $\beta$ -lactamase Inhibitors”, *Open Forum Infect. Dis.*, 10, ofad014 (2023). doi: 10.1093/ofid/ofad014
161. Z. Zhao, X. Shen, S. Chen, J. Gu, H. Wang, M. F. Mojica, M. Samanta, D. Bhowmik, **A.J. Vila**, R. A. Bonomo and S. Haider “Gating interactions steer loop conformational changes in the active site of the L1 metallo- $\beta$ -lactamase”, *eLife*, **12**:e83928 (2023).

160. P. Hinchliffe, M. F. Mojica, C. J. Schofield, G. I. Dmitrienko, R. A. Bonomo, **A. J. Vila** and J. Spencer "Preferential binding modes and stereoisomers of hydrolyzed  $\beta$ -lactams with the dizinc L1 metallo  $\beta$ -lactamase as defined by crystallography", *J. Biol. Chem.*, en prensa. doi: 10.1016/j.jbc.2023.104606 (2023).
159. C. McCann, M. Quinteros, I. Adelugba, M.N. Morgada, A. R. Castelblanco, E. Davis, A. Lanzirotti, S. J. Hainer, **A.J. Vila**, J. G. Navea and T. Padilla-Benavides "The mitochondrial Cu + transporter PiC2 (SLC25A3) is a target of MTF1 and contributes to the development of skeletal muscle in vitro", *Front. Mol. Biosci.* 9:1037941. doi: 10.3389/fmolb.2022.1037941 (2022).
158. M.A. Rossi, T. Palzill, F.C.L. Almeida and **A.J. Vila** "Slow protein dynamics elicits new enzymatic functions by means of epistatic interactions", *Mol. Biol. Evol.*, 39(10):msac194. doi: 10.1093/molbev/msac194 (2022).
157. J. Szuster, A.J. Leguto, U. A. Zitare, J.P. Rebecchi, **A.J. Vila** and D. H. Murgida "An Engineered Purple Mononuclear Copper Site Featuring Unprecedented Entropic Control of the Reduction Potential", *Bioelectrochemistry*, 146: 108095. doi: 10.1016/j.bioelechem.2022.108095 (2022).
156. C.A. Colque, P.E. Tomatis, A.G. Albarracín Orio, G. Dotta, D.M. Moreno, G. Hedemann, R.A. Hickman, L.M. Sommer Madsen, S. Feliziani, A.J. Moyano, R.A. Bonomo, H.K. Johansen, S. Molin, **A.J. Vila\*** and A.M. Smania\* "Longitudinal Development of Antibiotic Resistance in Cystic Fibrosis Reveals Diverse Evolutionary Pathways", *mBio*, e0166322. doi: 10.1128/mbio.01663-22 (2022). \*Autores corresponsales.
155. L.J. Rojas, M. Yasmin, J. Benjamino, S.M. Marshall, K.J. DeRonde, N.P. Krishnan, F. Pérez, A.A. Colin, M. Cardenas, O. Martinez, A. Pérez-Cardona, D. D. Rhoads, M.R. Jacobs, J. J. LiPuma, M.W. Konstan, **A.J. Vila**, A. Smania, A.R. Mack, K. Card, J.G. Scott, M.D. Adams, L.M. Abbo and R.A. Bonomo "Genomic heterogeneity underlies multidrug resistance in *Pseudomonas aeruginosa*: a population-level analysis beyond susceptibility testing", *PLoS ONE*, 17(3):e0265129. doi: 10.1371/journal.pone.0265129 (2022).
154. C. Le, C. Pimentel, F. Pasteran, M. R. Tuttobene, T. Subils, J. Escalante, B. Nishimura, S. Arriaga, A. Carranza, V. Mezcord, **A. J. Vila**, A. Corso, L. A. Actis, M. E. Tolmasky, R. A. Bonomo and M. S. Ramirez "Human Serum Proteins and Susceptibility of *Acinetobacter baumannii* to Cefiderocol: role of iron transport", *Biomedicines*, 10(3):600. doi: 10.3390/biomedicines10030600 (2022).
153. C. López, J. Delmonti, R.A. Bonomo and **A.J. Vila** "Deciphering the evolution of metallo- $\beta$ -lactamases: a journey from the test tube to the bacterial periplasm", *J. Biol. Chem.*, 298(3):101665. doi: 10.1016/j.jbc.2022 (2022).
152. G. Bahr, L.J. González and **A.J. Vila** "Metallo- $\beta$ -lactamases and a tug-of-war for the available zinc at the host-pathogen interface", *Curr. Opin. Chem. Biol.*, 66:102103 (2022). doi: 10.1016/j.cbpa.2021.102103.
151. M.F. Mojica, M.A. Rossi, **A.J. Vila\*** and R.A. Bonomo\* "The Urgent Need for Metallo- $\beta$ -Lactamase Inhibitors: a silent global threat", *Lancet Infectious Diseases*, 22:e28-e34 (2022). doi: 10.1016/S1473-3099(20)30868-9. \*Autores corresponsales.
150. P. Hinchliffe, D.M. Moreno, M.A. Rossi, M.F. Mojica, V. Martinez, V. Villamil, B. Spellberg, G. Drusano, C. Banchio, G. Mahler, R. A. Bonomo, **A.J. Vila** and J. Spencer "2-Mercaptomethyl thiazolidines (MMTZs) inhibit all metallo- $\beta$ -lactamase classes by maintaining a conserved binding mode", *ACS Infectious Diseases*, 7, 2697-2706 (2021).
149. C. López, A. Prunotto, G. Bahr, R.A. Bonomo, L. J. González, M. Dal Peraro and **A.J. Vila** "Specific protein-membrane interactions promote the export of metallo-  $\beta$ -lactamases via outer membrane vesicles", *Antimicrob. Agents Chemother.*, 65(10):e0050721 (2021). doi: 10.1128/AAC.00507-2.
148. M.M.B. Martínez, R.A. Bonomo, **A.J. Vila**, P. C. Maffia and L. J. González "On the offensive: the Role of Outer Membrane Vesicles in the successful dissemination of NDM-1  $\beta$ -lactamase", *mBio*, 12(5):e0183621 (2021). doi: 10.1128/mBio.01836-21

147. G. Bahr, L.J. González and **A.J. Vila** “Metallo- $\beta$ -lactamases in the age of multidrug resistance: from structure and mechanism to evolution, dissemination and inhibitor design”, *Chemical Reviews*, **121**, 7957-8094 (2021).
146. J. Martinez, C. Razo-Gutierrez, C. Le, R. Courville, C. Pimentel, C. Liu, S.E. Fung, M.R. Tuttobene, K. Phan, **A.J. Vila**, P. Shahrestani, V. Jimenez, M. E. Tolmasky, S. A. Becka, K. M. Papp-Wallace, R. A. Bonomo, A. Soler-Bistué, R. Sieira and M. S. Ramírez “Cerebrospinal fluid (CSF) augments metabolism and virulence expression factors *Acinetobacter baumannii*”, *Sci. Reports*, **11**, 4737 (2021).
145. G.T. Antelo, **A.J. Vila**, D.P. Giedroc and D.A. Capdevila “Molecular evolution of transition metal bioavailability at the host-pathogen interface”, *Trends in Microbiology*, **29**, 441-457 (2021).
144. M.A. Rossi, V. Martinez, P. Hinchliffe, M.F. Mojica, V. Castillo, R. Smith, B. Spellberg, G. Drusano, C. Banchio, R. A. Bonomo, J. Spencer, **A.J. Vila\*** and Graciela S. Mahler\* “2-Mercaptomethyl-thiazolidines utilize conserved aromatic-S interactions to achieve broad-range inhibition of metallo- $\beta$ -lactamases”, *Chemical Science*, **12**, 2898-2908 (2021). \*Autores corresponsales.
143. A. Prunotto, G. Bahr, L.J. González, A.J. Vila\* and M. Dal Peraro\* “Structural bases of membrane association of New Delhi metallo- $\beta$ -lactamase 1”, *ACS Infectious Diseases*, **9**, 2719-2731 (2020). \*Autores corresponsales.
142. D. Rodgers, F. Pasteran, M. Calderon, S. Jaber, G.M. Traglia, E. Albornoz, A. Corso, A.J. Vila, R.A. Bonomo, M. D. Adams and M. S. Ramirez “Characterization of ST25 blaNDM-1 producing *Acinetobacter* spp. strains leading the increase in NDM-1 emergence in Argentina” *J.Glob.Antimicrob.Resist.* **23**, 108-110 (2020).
141. F. Huang, N. Fitchett, C. Razo-Gutierrez, C. Li, J. Martinez, G. Ra, Carolina López, L. J. González, R. Sieira, A. J. Vila, R. A. Bonomo, and M. S. Ramirez “The H-NS regulator plays a role in the stress induced by carbapenemase expression in *Acinetobacter baumannii*” *mSphere*, **5**:e00793-20 (2020). doi: 10.1128/mSphere.00793-20
140. U. Zitare; J. Szuster; M. C. Santalla; M.N. Morgada; A.J. Vila and D.H. Murgida “Dynamical effects in metalloprotein heterogeneous electron transfer”, *Electrochimica Acta*, **342** (2020) 136095. <https://doi.org/10.1016/j.electacta.2020.136095> IF: 6.901
139. A. R. Palacios, M.A. Rossi, G. S. Mahler and A.J. Vila “Metallo- $\beta$ -Lactamase Inhibitors inspired on Snapshots from the Catalytic Mechanism”, *Biomolecules* **10**(6): E854. doi: 10.3390/biom10060854 (2020). Special Issue “Beta-Lactamases: Sequence, Structure, Function, and Inhibition”. IF: 4.879
138. J. Szuster,; U. Zitare; M. Castro; A. Leguto; M.N. Morgada; A.J. Vila and D.M. Murgida “CuA-Based Chimeric T1 Copper Sites Allow for Independent Modulation of Reorganization Energy and Reduction Potential”, *Chemical Science*, **11**, 6193-6201 (2020). doi: 10.1039/d0sc01620a IF:9.825
137. Adams MD, Pasteran F, Traglia GM, Martinez J, Huang F, Liu C, Fernandez JS, Lopez C, Gonzalez LJ, Albornoz E, Corso A, Vila AJ, Bonomo RA, Ramirez MS. “Distinct mechanisms of dissemination of NDM-1 metallo  $\beta$ -lactamase in *Acinetobacter* spp. in Argentina” *Antimicrob. Agents Chemother.* **64**(5): e00324-20. pii: AAC.00324-20. doi: 10.1128/AAC.00324-20 (2020). IF: 5.191
136. M. N. Morgada, M.E. Llases, E. Giannini, M.A. Castro, P.M. Alzari, D.H. Murgida, M.N. Lisa and A. J. Vila “Electron spin density on the axial Methionine ligand in Cu<sub>A</sub> suggests electron transfer pathways”, *Chem.Comm.*, **56**, 1223-1226 (2020). DOI: 10.1039/c9cc08883k IF: 6.222
135. A.R. Mack, M.D. Barnes, M.A.Taracila, A.M. Hujer, K.M. Hujer, G. Cabot, M. Feldgarden, D.H. Haft, W. Klimke, F. van den Akker, A. J. Vila, A. Smania, S. Haider, K. M. Papp-Wallace, P.A. Bradford, G.M. Rossolini, J.-D. Docquier, J.-M. Frère, M. Galleni, N. D. Hanson, A. Oliver, P. Plésiat, L. Poirel, P. Nordmann, T.G. Palzkill, G. A. Jacoby, K. Bush and R. A. Bonomo “A standard numbering scheme for class C  $\beta$ -lactamases”, *Antimicrob Agents Chemother.*, **64**(3):e01841-19 (2020). DOI: 10.1128/AAC.01841-19 IF: 5.191

134. J. Martinez, J. S. Fernandez, C. Liu, A. Hoard, A. Mendoza, J. Nakanouchi, N. Rodman, R. Courville, M. R. Tuttobene, C. Lopez, L. J. Gonzalez, P. Shahrestani, K. M. Papp-Wallace, A. J. Vila, M. E. Tolmasky, R. A. Bonomo, R. Sieira and M. S. Ramirez "Human pleural fluid triggers global changes in the transcriptional landscape of *Acinetobacter baumannii* as an adaptive response to stress", *Sci. Reports*, 9, 17251 (2019) doi:10.1038/s41598-019-53847-2. IF: 4.379
133. E. Giannini, L. J. González and A. J. Vila "A simple protocol to characterize bacterial cell-envelope lipoproteins in a native-like environment", *Protein Sci.*, 28, 2004-2010 (2019). DOI: 10.1002/pro.3728 IF: 6.725
132. M. E. Llases, M. N. Morgada and A. J. Vila "Biochemistry of copper site assembly in heme-copper oxidases: A theme with variations", *Int. J. Mol. Sci.*, pii: E3830. doi: 10.3390/ijms20153830 (2019). Special Issue: "Copper in Biology: Maturation of Copper Proteins and Copper Homeostasis". IF: 5.923
131. M. N. Morgada, F. Emiliani, D. Álvarez-Paggi, D. H. Murgida, L. A. Abriata and A. J. Vila "pH-induced binding of the axial ligand in an engineered CuA site favors the  $\pi$  state", *Inorg. Chem.*, 58, 15687-15691 (2019). DOI: 10.1021/acs.inorgchem.9b01868 IF: 5.165
130. S. Soma, M. N. Morgada, M. T. Naik, A. Boulet, N. Dziuba, A. Ghosh, Q. Yu, P. A. Lindahl, J. S. B. Ames, S. C. Leary, A. J. Vila\* and V. M. Gohil\* "COA6 is structurally tuned to function as a thiol-disulfide reductase in copper delivery to the mitochondrial cytochrome c oxidase", *Cell Reports*, 29, 4114-4126.e5 (2019). DOI: 10.1016/j.celrep.2019.11.054 IF: 9.423
129. M. E. Llases, M. N. Lisa, M. N. Morgada, E. Giannini, P. M. Alzari and A. J. Vila "A thaliana Hcc1 is a Sco-like metallochaperone for CuA assembly in Cytochrome c Oxidase", *FEBS J.*, 287, 749-762 (2019). DOI: 10.1111/febs.15016 IF: 5.542
128. C. López, J. A. Ayala, R. A. Bonomo, L. J. González and A. J. Vila "Protein determinants of dissemination and host specificity of Metallo- $\beta$ -lactamases", *Nature Communications*, 10(1):3617. 10.1038/s41467-019-11615-w (2019). IF: 14.919
127. M. F. Mojica, J. D. Rutter, M. Taracila, L. A. Abriata, D. E. Fouts, K. M. Papp-Wallace, J. J. LiPuma, A. J. Vila and Robert A. Bonomo "Population Structure, Molecular Epidemiology and  $\beta$ -lactamase diversity among *Stenotrophomonas maltophilia*", *mBio*, pii: e00405-19 (2019). doi: 10.1128/mBio.00405-19 IF: 7.867
126. M. Ross; O. Fisher; M. N. Morgada; M. Krzyaniak; M. Wasielewski; A. J. Vila; B. M. Hoffman; and A. Rosenzweig "Formation and electronic structure of an atypical CuA site", *J. Am. Chem. Soc.*, 141, 11, 4678-4686 (2019) DOI: 10.1021/jacs.8b13610 IF: 15.419
125. U. A. Zitare, J. Szuster, M. Santalla, M. E. Llases, M. N. Morgada, A. J. Vila and D. H. Murgida "Fine tuning of functional features of the CuA site by loop-directed mutagenesis", *Inorg. Chem.*, 58, 2149-2157 (2019).
124. A. J. Leguto, M. A. Smith, M. N. Morgada, U. A. Zitare, D. H. Murgida, K. M. Lancaster and A. J. Vila "Dramatic electronic perturbations of CuA centers via subtle geometric changes", *J. Am. Chem. Soc.*, 141, 1373-1381 (2019).
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- $\beta$ -lactamases is Tuned by the Conformation of an Active Site Mobile Loop", *Antimicrob Agents Chemother.* doi: 10.1128/AAC.01754-18. (2018).
122. U. A. Zitare, J. Szuster, M. F. Scocozza, 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", *Electrochimica Acta*, 294, 117-125 (2018).
121. A. Espinoza-Cara, U. A. Zitare, D. Alvarez-Paggi, S. Klinke, L. H. Otero, D. H. Murgida and **A. J. Vila** "Engineering a bifunctional copper site in the cupredoxin fold by loop-directed mutagenesis", *Chem. Sci.*, 9, 6692 - 6702 (2018).
120. L. J. González, C. Stival, J. L. Puzzolo, D. M. Moreno and **A. J. Vila** "Shaping substrate selectivity in a broad spectrum metallo- $\beta$ -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- $\beta$ -lactamases", *Nature Communications*, **8**, 538 (2017) doi: 10.1038/s41467-017-00601-9.
114. M. Roger, G. Sciarra, F. Biaso, E. Lojou, X. Wang, M. Bauzan, M.T. Giudici-Ortoni, **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  $\beta$ -lactam resistance conferred by metallo- $\beta$ -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  $\beta$ -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- $\beta$ -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- $\beta$ -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 Delhi 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- $\beta$ -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<sub>A</sub> 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 Cu<sub>A</sub> 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- $\beta$ -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- $\beta$ -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- $\beta$ -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<sub>A</sub> 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<sub>A</sub> 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- $\beta$ -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- $\beta$ -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- $\beta$ -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- $\beta$ -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- $\beta$ -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- $\beta$ -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- $\beta$ -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- $\beta$ -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- $\beta$ -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- $\beta$ -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<sub>A</sub> 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- $\beta$ -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- $\beta$ -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<sub>A</sub> 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- $\beta$ -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 Zn<sub>2</sub> Position in Metallo- $\beta$ -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 Cu<sub>A</sub> 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- $\beta$ -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- $\beta$ -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- $\beta$ -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 Zn<sup>2</sup> 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-b-lactamases: Novel Weaponry for Antibiotic Resistance in Bacteria", *Acc. Chem.Res*, **39**, 721-728 (2006). *Review.*
51. G. E. Schujman, M.Guerin, A.Buschiazzi, 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 <sup>1</sup>H 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 <sup>1</sup>H 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  $\beta$ -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- $\beta$ -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  $^1\text{H}$  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  $\beta$ -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- $\beta$ -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*  $\beta$ -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  $^1\text{H}$  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** " $^1\text{H}$ - $^{13}\text{C}$  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- $\alpha$ -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<sub>4</sub>S<sub>4</sub> 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.Cravero 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 <sup>13</sup>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 "<sup>31</sup>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 "<sup>13</sup>C 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 <sup>13</sup>C 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

7. G. Bahr, P.E. Tomatis and **A.J. Vila** "The Biochemistry and Enzymology of Zinc Enzymes", Chapter in the Section "Bioinorganic chemistry and homogeneous biomimetic inorganic

catalysis”, Volumen 2 de la enciclopedia “Comprehensive Inorganic Chemistry III”, Editors-in-Chief: Jan Reedijk, Kenneth Poeppelmeier en prensa (2023).

6. M. N. Morgada, D.H. Murgida and **A.J. Vila** “Purple Mixed-Valent Copper A”, in “Transition Metals and Sulfur: A Strong Relationship for Life”, from the Series “Metals Ions in Life Sciences”, Vol. 20 (Peter Kroneck, Editor), Editorial Springer (2020).

5. M.M. González and **A. J. Vila** “An Elusive Task: A Clinically Useful Inhibitor of Metallo- $\beta$ -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- $\beta$ -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- $\beta$ -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, XXII Reunión Científica de la Sociedad Argentina de Biofísica, Maciel (Rosario), 1993.
- Chairman del Primer Workshop Argentino de Química Bioinorgánica, Rosario, 2004.
- Miembro del International Organizing Committee, First Latin American Protein Society Meeting (LAPSM), Angra dos Reis, Brasil, 2004.
- Chairman, XXXV Reunión Anual de la Sociedad Argentina de Biofísica, Rosario, 2006.
- Chairman, Third Latin American Protein Society Meeting (LAPSM), 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) Rio de Janeiro, Brasil, 2013.
- Miembro del Scientific Committee, 4<sup>th</sup> LABIC (Latin American Meeting on Biological Inorganic Chemistry), Chascomús, 2014.
- Chairman, Workshop on Biología Estructural, EMBL, Rosario, 2015.
- Miembro del Comité Organizador, X Iberoamerican NMR Meeting, Cartagena de Indias, Colombia, 2016.
- Chairman, 2nd Latin American Metabolic Profiling Symposium, Rosario, 2016.
- Co-Chair, ICBIC-18 (International Conference for Biological Inorganic Chemistry), Florianopolis, Brasil, 2017.
- Co-Chair Grupo de Afinidad de Ciencia del grupo G-20 (S20), Rosario, 2018.

#### 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, 1993.
2. "Estudios espectroscópicos de los efectos de mutaciones orgánicas e inorgánicas en metaloproteínas", XXXI Reunión Anual, SAIB, Villa Giardino, 1995.
3. "Centros metálicos en proteínas: Déme dos". 34 Reunión Anual, Sociedad Argentina de Investigaciones en Bioquímica y Biología Molecular, Mendoza, 1998.
4. "Estructura electrónica de centros de cobre en proteínas de cobre de transferencia electrónica" X Congreso Argentino de Fisicoquímica, Santa Fe, 1999.
5. "Estudios estructurales en metaloproteínas mediante RMN", Simposio de Biología Molecular Estructural, Instituto de Investigaciones Bioquímicas "Luis F.Leloir", Buenos Aires, 1999.
6. "Proteínas de cobre de transferencia electrónica: el color y sus consecuencias", Reunión Anual, Sociedad Argentina de Biofísica, Tafí del Valle, 2001.
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.
8. "Determinantes estructurales de reactividad y unión de sustrato en Metallo- $\beta$ -lactamasas", Simposio de Biología Molecular Estructural, Fundación Instituto Leloir, Buenos Aires, 2004.
9. "Evolution and catalytic mechanism of Metallo- $\beta$ -Lactamases", Coloquio Argentino-Alemán de Biotecnología y Química, Tucumán, 2004.

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.
11. "RMN de metaloproteínas paramagnéticas", Tercer Workshop de Química Bioinorgánica DQIAQF e INQUIMAE, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Buenos Aires, 2008.
12. "Catalytic Mechanism and Evolution of Metallo- $\beta$ -Lactamasas", XXVII Congreso Argentino de Química "Dr. Pedro J. Aymonino", Tucumán, 2008. Conferencia Plenaria.
13. "Reconocimiento de sustrato y evolución de metalo- $\beta$ -lactamasas: un juego perverso entre promiscuidad y diversidad", XXIII Jornadas Argentinas de Microbiología, Asociación Argentina de Microbiología, Rosario, 2008. Conferencia Inaugural.
14. "O-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. "O-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, 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, 2014.
20. "Metallo-beta-lactamasas: La última frontera de resistencia a carbapenemes en Enterobacterias, podemos detenerlas?", Jornadas Argentinas de Microbiología 2014, Córdoba, Argentina, Agosto, 2014. Conferencia Inaugural.
21. "Nuevos mecanismos de resistencia a antibióticos y diseño de fármacos", XXV Jornadas Científicas Anuales ACREM, Rosario, Argentina, 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, 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, 2014.
24. "How do Sco Proteins Score the COX?", XLIII Reunión Annual de la Sociedad Argentina de Biofísica, Sierra de la Ventana, 2014.
25. "Towards a Rational Control of the Electronic Structure of Electron Transfer Metalloproteins", 13ª Conferencia Latinoamericana de Fisicoquímica Orgánica, Villa Carlos Paz, Córdoba, 2015.
26. "Mecanismo catalítico, inhibición y evolución de metalo- $\beta$ -lactamasas", XX CAFQI, Villa Carlos Paz, Córdoba, 2017.
27. "The last frontier of antibiotic resistance: at the heart of protein evolution", Reunión Conjunta de Sociedades de Biociencias, Buenos Aires, 2017.
28. "Estrategia para la inhibición de MBL: ¿qué hacemos con estos metales?". Congreso de SADEBAC, Buenos Aires, 2018.
29. "Evolución de Metallo-beta-lactamasas y Super bacterias: la última frontera de defensa bacteriana frente a carbapenemes", Congreso SBR Rosario, 2018.
30. "Estrategias para la inhibición de Metallo-Beta-Lactamasas: ¿Qué hacemos con estos metales?, Sociedad Argentina de Bacteriología (SADEBAC), 2018.

31. "Evolución de Metallo-beta-lactamasas y Super bacterias: la última frontera de defensa bacteriana frente a carbapenemes", Sociedad de Biología de Rosario, 2018.
32. "Nuevos Mecanismos Moleculares en la Adaptación y Evolución de Carbapenemasas: algo viejo, algo nuevo, algo prestado", Congreso Argentino de Microbiología, 2018.
33. "Evolución de proteínas: yendo del tubo de ensayo a la proteína", Ciclo Quién es quién en Biofísica, Agrupación de Universidades Grupo Montevideo, 2020.
34. "Evolución de proteínas: yendo del tubo de ensayo a la proteína", Conferencia Especial Asociación Argentina de Bioinformática y Biología Computacional (A2B2C), 2021.

#### INTERNACIONALES

35. "Paramagnetic NMR as a characterization tool for blue copper proteins", XXXII International Conference on Coordination Chemistry, Santiago de Chile, 1997.
36. "Paramagnetic NMR studies in electron transfer copper proteins", III Iberoamerican Congress of Biophysics, Buenos Aires, 1997.
37. "Paramagnetic NMR Studies in Electron Transfer Copper Proteins", 4th European Conference on Bio-inorganic Chemistry, Sevilla, España, 1998.
38. "Structure-function relationship in a Binuclear Zinc  $\beta$ -Lactamase" XXXIII International Conference on Coordination Chemistry, Florencia, Italia, 1998.
39. "Metallo- $\beta$ -lactamases: Does it take two to tango?" IX International Conference on Biological Inorganic Chemistry, Minneapolis, USA, 1999.
40. "Paramagnetic NMR Studies in Electron Transfer Copper Proteins" XIX International Conference on Magnetic Resonance in Biological Systems, Florencia, Italia, 2000.
41. "NMR Spectroscopy of Paramagnetic Metalloproteins", International Workshop on Spectroscopy for Biology, Sao Paulo, Brasil, 2000.
42. "Metal Site Redesign in a Zinc  $\beta$ -Lactamase", X International Conference on Biological Inorganic Chemistry, Florence, Italy, 2001.
43. "Re-engineering the Active Site Redesign in Metallo  $\beta$ -Lactamases", IX Workshop on Metallo- $\beta$ -Lactamases, Holy Island, Inglaterra, 2002.
44. "Metal Site Redesign in a Metallo- $\beta$ -Lactamase", International Biophysics Congress, Buenos Aires, 2002.
45. "Electronic structure of paramagnetic electron transfer copper centers in proteins by NMR", International Colloquia on NMR in Biology, Florencia, Italia, 2002.
46. "NMR Spectroscopy of Paramagnetic Electron Transfer Copper Proteins" Gordon Research Conference "Metals in Biology", Ventura, USA, 2003.
47. "Metal Site Re-engineering in Zinc  $\beta$ -lactamases", Workshop on Structure and Function of Metalloproteins, Mito, Japón, 2003.
48. "NMR Spectroscopy of Paramagnetic Electron Transfer Copper Proteins", Okazaki, Japón, 2003.
49. "Rational and Combinatorial Redesign of Metallo- $\beta$ -lactamases" 7th International Symposium on Applied Bioinorganic Chemistry, Guanajuato, Mexico, 2003.
50. "Paramagnetic NMR Spectroscopy of Electron Transfer Copper Proteins", Workshop on Nuclear Magnetic Resonance in Biology, Campinas, Brasil, 2004.
51. "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, 2004.
52. "Zinc  $\beta$ -lactamases: modular metalloenzymes designed for antibiotic resistance", 36th International Conference on Coordination Chemistry ICC, Mérida, Mexico, 2004.
53. "In vitro evolution and rational redesign of the catalytic machinery of metallo-beta-lactamases", First Latin American Protein Society Meeting, Angra dos Reis, Brasil, 2004.
54. "NMR Spectroscopy of electron transfer copper proteins", 1st Iberoamerican NMR Meeting, Angra dos Reis, Brasil, 2005.

55. "Substrate recognition and directed evolution of *B.cereus* metallo- $\beta$ -lactamase", 9th Workshop on beta-lactamases, Leonessa, Italia, 2005.
56. "Directed Evolution in Metallo- $\beta$ -Lactamases: Natural vs. in vitro Fine Tuning of Enzyme Activity", 34 Reunion Anual, Sociedade Brasileira de Bioquímica e Biologia Molecular, SBBq, Aguas de Lindoia, 2005.
57. "Diversity, evolution and mechanism of zinc  $\beta$ -lactamases", XII International Conference on Biological Inorganic Chemistry, Ann Arbor, Michigan, 2005.
58. "Diversity, evolution and mechanism of zinc  $\beta$ -lactamases", Conference on Drug Development for the Third World, Trieste, Italia, 2006.
59. "Catalytic mechanism and evolution of metallo- $\beta$ -lactamases", 8<sup>th</sup> European Conference in Biological Inorganic Chemistry, Aveiro, Portugal, 2006.
60. "Structural diversity, catalytic mechanism and evolution of metallo- $\beta$ -lactamases" Symposium "The Biological Chemistry of Macromolecules" Cinvestav, Mexico, 2006.
61. "Evolution of substrate specificity in class B  $\beta$ -lactamases", 46<sup>th</sup> Interscience Conference on Antimicrobial Agents and Chemotherapy, San Francisco, USA, 2006.
62. "NMR Studies of Electron-Transfer Copper Proteins", 11<sup>th</sup> Nuclear Magnetic Resonance Users Meeting, Angra dos Reis, Brasil, 2007.
63. "Substrate recognition by metallo- $\beta$ -lactamases: Selectivity, promiscuity and evolution", International Symposium on Molecular Recognition Phenomena in Biopolymers, Real Academia Sevillana de Ciencias, Sevilla, 2007.
64. "Effect of remote and second shell mutations in enzymes from the metallo- $\beta$ -lactamase superfamily", 6<sup>th</sup> International Conference of Biological Physics, Montevideo, 2007.
65. "Structural studies and electron transfer on Cytochrome *c* Oxidases", V International Conference on Peroxynitrite and Reactive Nitrogen Species, "Free Radicals in Montevideo", Montevideo, 2007.
66. "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, 2007.
67. "Dissecting evolutionary traits in Zinc  $\beta$ -lactamases", LAPS 2nd Latin American Protein Society Acapulco, 2007.
68. "Catalytic mechanism and evolution of metallo- $\beta$ -lactamases", Workshop Max-Planck, "Multiparametric probes and agents of cellular function", Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Buenos Aires, Argentina, 2007.
69. Mechanistic studies on *B.cereus* metallo- $\beta$ -lactamase BcII", 10th  $\beta$ -Lactamase Meeting, Eretria, Grecia, 2008.
70. "Catalytic Mechanism and Evolutionary traits of zinc  $\beta$ -lactamases: Does it take two to tango?" Chinese Chemical Conference, China, 2008.
71. "NMR Studies on Multinuclear Copper Proteins", 6<sup>o</sup> International Copper Meeting: Copper and Related Metals in Biology, Alghero, 2008.
72. "Adaptive Evolution of Metallo-beta-Lactamases Grants Organismal Fitness by Improving Catalysis and Flexibility", Gordon Research Conference "Microbial Population Biology", Boston, 2009.
73. "Catalytic Mechanism and Evolutionary Traits of zinc  $\beta$ -lactamases: Does it take two to tango?", 3<sup>rd</sup> European Conference on Chemistry for Life Sciences, Frankfurt, 2009.
74. "Structure, Catalysis and Evolution of zinc  $\beta$ -lactamases", VII Iberoamerican Congress of Biophysics, Buzios, 2009.
75. "Mecanismo catalítico, estructura y evolución de metalo-beta-lactamasas: Darwin a escala molecular" Conferencia Inaugural, 1er Encuentro Nacional de Química, Montevideo, 2009.
76. "Prospects for inhibition of metallo-beta-lactamases" 20<sup>th</sup> European Congress of Clinical Microbiology and Infectious Diseases, Viena, 2010.

77. "Invisible states in paramagnetic copper proteins", Joint EUROMAR 2010 and 17<sup>th</sup> ISMAR Conference, Florencia, 2010.
78. "Catalytic Mechanism and Evolutionary traits of zinc  $\beta$ -lactamases: Does it take two to tango?" XI International Symposium on Inorganic Biochemistry, Kudowa Zdrój, Polonia, 2010.
79. "Invisible states in paramagnetic copper proteins studied by NMR", 13th NMR User meeting of the Brazilian AUREMN, Angra dos Reis, Brasil, 2011.
80. "Invisible states in paramagnetic copper proteins studied by NMR", 241<sup>st</sup> ACS National Meeting, Anaheim, California, 2011.
81. "Catalytic Mechanism and Evolutionary Traits of Zinc  $\beta$ -Lactamases: Does It Take Two to Tango?, VII Reunión Científica de Bioinorgánica", Águilas España, 2011.
82. "Metal Site Redesign in a Zinc beta-Lactamase", ICBIC 15, Vancouver, Canadá, 2011.
83. "Mechanistic clues for the inhibition of zinc  $\beta$ -lactamases", 243rd ACS National Meeting & Exposition, San Diego, California, 2012.
84. "Fine tuning of the electronic structure of the dinuclear copper site CuA", XVI Brazilian Meeting on Inorganic Chemistry, BMIC, Florianopolis, Brasil, 2012.
85. "Mechanistic clues for the inhibition of zinc beta-lactamases", 52 ICAAC, San Francisco, California, 2012.
86. "Metallo-beta-lactamases: antibiotic resistance and the role of periplasmic Zn(II)", Zing Conference; Bioinorganic Chemistry Conference, Lanzarote, España, 2013.
87. "Catalytic mechanism and evolutionary traits of Zn-dependent beta-lactamases", XII Symposium on Metal Ions in Biology and Medicine, Montevideo, Uruguay, 2013.
88. "Mechanism-based design of four novel metallo beta-lactamase broad spectrum bithiazolidine inhibitors", 23rd ECCMID, Berlin Germany, 2013.
89. "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, Brasil, 2013.
90. "Alternative ground states in copper proteins unveiled by NMR spectroscopy: A novel view for biological electron transfer", 18th ISMAR Meeting, 14th NMR Users Meeting, V<sup>th</sup> Iberoamerican NMR Meeting Biomedical Imaging Symposium, Rio de Janeiro, Brasil, 2013.
91. "Alternative ground states in the CuA center and its possible role in electron transfer", ICBIC 16, Grenoble, Francia, 2013.
92. "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, Huatulco, México, 2013.
93. "Dissection of the in vivo interplay of molecular features determining protein evolution", XII PABMB Congress, Puerto Varas, Chile, 2013.
94. 1st Latin-American Symposium on Metabolic Profiling promoted by the Latin American Metabolic Profiling Society, Lima, Perú, 2014.
95. "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, Grosseto, Italy, 2014.
96. "Mechanism based inhibitors of metallo-beta-lactamases", 12th Beta-Lactamase Meeting International Workshop, Gran Canaria, España, 2014.
97. "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, 2014. Conferencia Plenaria.
98. "Unraveling the mechanism of assembly of the CuA center in cytochrome oxidases", Latin American summit meeting on "Biological Crystallography and Complementary Methods", Campinas, Brasil, 2014.
99. "Unraveling the mechanism of assembly of the CuA center in cytochrome oxidases", 9th International Copper Meeting, Vico Equense, Italia, 2014.

100. "Catalytic Mechanism and Inhibitor Design of Zinc-lactamases: Does it Take Two to Tango?", Semana de la Química en Florianópolis, 2015.
101. "Fine tuning of the catalytic efficiency and metal binding features in metalloenzymes by Outer Sphere residues", ACS, Boston, USA, 2015.
102. "The evolution pathway of beta-lactamases", ICAAC, San Diego, USA, 2015.
103. "Role of the metal binding loops in cofactor assembly and electronic structure of a copper site in cytochrome oxidases", Latin American Crosstalk in Biophysics, Salto, Uruguay, 2015.
104. "Slow protein dynamics probed by NMR: at the heart of protein evolvability" Chianti Workshop "Magnetic Resonance for Cellular Structural Biology", Grosseto, Italy, 2016.
105. "Novel molecular mechanisms improving fitness in zinc-dependent carbapenemases" Gordon Research Conference on Drug Resistance, 2016.
106. "Slow protein dynamics probed by NMR: at the heart of protein evolvability" IberoAmerican NMR meeting. Cartagena, Colombia, 2016.
107. "Metallo-beta-lactamases in the periplasm: Raiders of the lost Zinc?", LABIC, Queretaro, Mexico, 2016.
108. "Novel molecular mechanisms improving fitness in zinc-dependent carbapenemases", V LAPS Meeting, Rio de Janeiro, Brasil, 2016.
109. "A general reaction mechanism for mono-and binuclear metallo beta lactamases", 13th Beta Lactamase Meeting, L'Aquila, Italia, 2017.
110. "Metallo-Beta-Lactamases: Periplasmic Raiders of the Lost Zinc", Gordon Research Conference on the "Cell Biology of Metals", Vermont, USA, 2017.
111. "Metal site engineering in the cupredoxin protein fold", SILQCOM, Iguazú, Argentina, 2017. Conferencia Plenaria.
112. "Evolución, mecanismos adaptativos y diversidad estructural de metalo-beta-lactamasas: Acercando el laboratorio básico a la clínica", Congreso de Investigaciones, Universidad del Bosque, Bogotá, Colombia, 2017.
113. "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, 2017.
114. "Emerging insights into structure and function of beta-lactamases", European Conference on Clinical Microbiology and Infectious Diseases, ECCMID, Madrid, 2018.
115. "The last frontier of antibiotic resistance: At the heart of protein evolution" Symposium on Protein Biophysics at the end of the World, Santiago de Chile, 2018.
116. "Novel Molecular Mechanisms Providing Fitness in Carbapenem Resistance", Middleton Symposium, Cleveland, 2018.
117. "Novel Molecular Mechanisms Improving Fitness in Zn(II)-dependent Carbapenemases", Sociedad Brasileira de Bioquímica y Biología Molecular, SBBq, Joinville, Brasil, 2018.
118. "Metallo-β-lactamases: A Tug of War between Bacteria and the Immune System for the Available Zn(II)" Protein Society Meeting, Boston, 2018.
119. "Teoría y aplicaciones de la RMN de compuestos paramagnéticos", 4ta Reunión de RMN Experimental, Pachuca, Mexico, 2018.
120. "A. *thaliana* HHC1 is a Copper Chaperone", 11<sup>th</sup> International Copper Research Meeting, Sorrento, Italy, 2018.
121. "Novel Molecular Mechanisms Improving Fitness in Zn(II)-dependent Carbapenemases: A story on protein evolution", Congreso de la Sociedad Química Italiana, Caserta, Italia, 2018.
122. "Inhibitors against Metallo-beta-lactamases", ID Week, Infectious Diseases Society of America, Washington DC, 2019.
123. "Metallo-β-lactamases: A Tug of War between Bacteria and the Immune System for the Available Zn(II)", International Conference of Biological Inorganic Chemistry, Interlaken, Suiza, 2019. Plenary Lecture.

124. "Facing the threat of antimicrobial resistance: Inhibition of Metallo- $\beta$ -lactamases inspired by snapshots of the catalytic mechanism", LatinXChem Virtual meeting, 2020. Plenary Lecture.
125. "Evolutionary features of zinc-dependent carbapenemases: A tug of war between bacteria and the immune system for the available Zn(II)", Metal Zoom Series of Virtual Lectures of the Zinc Net, 2021.
126. "Inhibition of Metallo- $\beta$ -lactamases inspired by snapshots of the catalytic mechanism", 7<sup>th</sup> Latin American Meeting on Biological Inorganic Chemistry (LABIC), Montevideo (virtual), Plenary Lecture.
127. "Outer Membrane Vesicles (OMVs): A New Mechanism for the Dissemination of Resistance?", World Microbe Forum (ASM-FEMS), Invited Lecture, 2021.
128. "Metallo- $\beta$ -lactamases: A tug of war for the available Zn(II) in the bacterial periplasm", Inorganic Biochemistry Discussion Group, Royal Chemical Society, 2021.
129. "Metallo- $\beta$ -lactamases: A tug of war for the available Zn(II) in the bacterial periplasm", eBIC, Society for Inorganic Biological Chemistry, 2021.
130. "Protein dynamics at the heart of protein evolution", 22<sup>nd</sup> International Society for Magnetic Resonance (ISMAR) Conference and 9<sup>th</sup> Asia-Pacific NMR Symposium, 2021.
131. "The Adaptive Success of New Delhi Metallo-Beta-Lactamase Depends on the In-Cell Kinetic Protein Stability", Physical and Quantitative Approaches to Overcome Antibiotic Resistance, Thematic Meeting organized by the Biophysical Society, Stockholm, Sweden, 2022.
132. "Evolution of Metallo-Beta-Lactamases: A Tug of War for Zinc in the Bacterial Periplasm", Gordon Research Conference "Metals in Biology", Ventura, USA, 2023.
133. "Deciphering the evolution of metallo- $\beta$ -lactamases: a journey from the test tube to the bacterial periplasm", VIII Latin American Meeting on Biological Inorganic Chemistry (VIII LABIC), Chile, 2023.
134. "Evolution of NDM variants: A journey from the test tube to the bacterial periplasm", 14<sup>th</sup> Beta-Lactamase meeting, L'Aquila, Italia, 2023.

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); IFIBYNE; 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); Fundación INFANT; 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); University of California at Fullerton; 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); Novo Nordisk Foundation Center for Biosustainability (Danish Technical University, Dinamarca); Instituto Rocasolano-CSIC (Madrid, España); Hospital Ramón y Cajal (Madrid, España); Department of Chemistry, University of Florianopolis (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 and Biochemistry (University of Michigan, Ann Arbor); 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); University of Düsseldorf (Alemania); 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); Department of Biochemistry, University of Notre Dame (USA).

#### **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 Bolsa de Comercio de Rosario, 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, mayo 2017 y mayo 2019.
- 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).
- “Ciencia y gastronomía: la verdad de la milanesa”. Ciclo de charlas, “La Ciencia se va de copas”, (Bar el Cairo, Rosario, 2019).
- “¿Por qué nos gusta lo que nos gusta? En busca del Umami perdido” TEDxRosario 2020 Lab, 2020.
- “¿Por qué nos gusta lo que nos gusta? En busca del Umami perdido” Tecnopolis, 2021.

### **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 FOMECA, 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.
- Miembro del Comité Científico Internacional del IBioBA – Instituto de Investigación en Biomedicina de Buenos Aires, 2019.
- 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  $\beta$ -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  $\beta$ -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  $\beta$ -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  $\beta$ -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  $\beta$ -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- $\beta$ -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- $\beta$ -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- $\beta$ -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 oxidasa. **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

- Metabólica”. **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. Subsidio para colaboración Argentina-Francia (ECOS A15B01). **Institución otorgante:** MinCyT (Argentina). **Tema:** “Etudes structurales et dynamiques de protéines de relevance biomédicale et biotechnologique par une approche combinée de résonance magnétique nucléaire et cristallographie de rayons X” (2015-2018).
  36. Subsidio para colaboración Argentina-Italia. **Institución otorgante:** MinCyt-MAECI. **Tema:** In vivo protein stability as an Achilles heel to combat antibiotic resistance (2017-2020).
  37. Subsidio para colaboración Argentina-Suiza. **Institución otorgante:** CONICET- Swiss National Science Foundation. **Tema:** Role of Membrane Anchoring in Carbapenem Resistance Mediated by New Delhi Metallo- $\beta$ -Lactamases (2017-2020). Por concurso.
  38. 2R01AI100560-06A1 Research Grant (2018-2023). **Institución otorgante:** **National Institutes of Health**, National Institute of Allergy and Infectious Diseases (NIAID) **Tema:** A Mechanism-Based Approach to Metallo-beta-Lactamase Inhibition. **Monto:** USD 2.373.105. Por concurso.
  39. Subsidio de la provincia de Santa Fe, Ministerio de Ciencia, Tecnología e Innovación Productiva, Agencia Santafesina de Ciencia, Tecnología e Innovación, “Mejora de Servicios Tecnológicos 2017”, \$2.700.000. Por concurso.
  40. Subsidio para Proyecto de Investigación (PICT-2020-00031). **Institución otorgante:** Agencia Nacional de Promoción Científica y Tecnológica. **Tema:** Bases bioquímicas de la compatibilidad enzima-hospedador de  $\beta$ -lactamasas como determinantes de resistencia antimicrobiana. **Monto:** \$ 3.518.991. Por concurso.
  41. Office of Research & Development, US Department of Veteran Affairs, VA MERIT Program. “Biophysical screening of BTZ and TZ drugs” (co-PI). **Monto:** USD 84.000. Por concurso.
  42. Convenio de cooperación, Shionogi Ltd “Interaction of Cefiderocol with PER and NDM  $\beta$ -lactamase” (Co-PI). **Monto:** USD 95.000. Contrato de cooperación.
  43. SINERGIA project “Origins of broad-spectrum  $\beta$ -lactam resistance” (2021-2024) Swiss National Science Foundation (co-PI). **Monto:** 120.000 CHF. Por concurso

## 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, desde 2010. *Docente*. Este curso se dicta bianualmente, y es parte de la curricula de los Doctorados en Ciencias Químicas y en Ciencias Biológicas (Categoría A CONEAU).
- Curso de Posgrado "Bioquímica y Biofísica de proteínas de membrana" FCByF, UNR, desde 2018. *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).