

DR. JOEL B. ALDERETE T

DOCTOR EN CIENCIAS CON MENCIÓN EN QUÍMICA, UNIVERSIDAD DE CONCEPCIÓN, CHILE,
1995

LÍNEA(S) DE INVESTIGACIÓN O ÁREAS DE TRABAJO

- ✓ BIOMATERIALES, BIOCATALISIS; QUÍMICA COMPUTACIONAL

NÚMERO DE TESIS DE MAGÍSTER DIRIGIDAS EN LOS ÚLTIMOS 10 AÑOS (FINALIZADAS)

- ✓ Sergio Águila P., 19-01-06 Graduado

“Estudio de Relación Estructura Reactividad en la Biotransformación de Sesquiterpenos derivados del Eusdesmano por Rhizopus nigricans”

- ✓ Fabiola Medina N., 28-03-2012 Graduado

“Diseño de Mediadores-lacasa por métodos Químico Computacionales”

NÚMERO DE TESIS DE DOCTORADO EN CIENCIAS CON MENCIÓN EN QUÍMICA DIRIGIDAS EN LOS ÚLTIMOS 10 AÑOS (FINALIZADAS)

- ✓ Gonzalo Jaña V., 13-12-06, Graduado

“Estudio Químico-Computacional para la Inhibición de la Enzima ácido Acetohidroxi Sintasa, por una Sulfonilurea”

- ✓ Javier Silva A., 06-10-06 Graduado

“Biotransformaciones de Cetonas Proquirales Utilizando Levaduras y Hongos Filamentosos”

- ✓ Sergio Aguila Puentes, 10-08-06 Graduado

“Inmovilización de Proteína con Actividad Peroxidasa en Nanoestructuras y sus Aplicaciones Sobre Reacciones de Epoxidación de Olefinas

NÚMERO DE TESIS DIRIGIDAS O ACTIVIDAD FORMATIVA EQUIVALENTE GUIADA EN EL PROGRAMA, EN LOS ÚLTIMOS 10 AÑOS (FINALIZADAS)

✓ Gerardo Díaz Monsalves, 20-01-2009 Excede Permanencia

“Determinación de Propiedades de Interés Ambiental para Derivados Fenólicos Mediante Métodos Químico Cuánticos”

Magister en Ciencias c/m en Química

✓ Karen Navarrete F., 31.05-2013 Proyecto Aprobado

“Diseño de Compuestos con potencial actividad antitumoral en base al estudio bioinformático de la interacción tubulina-epotilona”

Doctorado en Ciencias c/m en Química

✓ Pabla Barra O., 31-05-2013 Proyecto Aprobado

“Diseño de nano-transportadores de fármacos dirigidos hacia la proteína E-selectina para su potencial utilización en tratamientos contra el cáncer”

Doctorado en Ciencias c/m en Química

✓ Luis F Barraza R., 22-05-2013 Proyecto Aprobado

“Síntesis, Simulación Molecular y Aplicación de Dendrimeros Pegilados como Transportadores de Fármacos Anticancerígenos de Liberación Controlada”

Doctorado en Ciencias c/m en Química

✓ Fabio Muñoz Guerrero., 06-01-2012 Proyecto Aprobado

“Reacciones de Epoxidación enantioselectivas de derivados del estireno, catalizadas por Cloroperoxidasa Inmovilizada sobre Soportes Nanoestructurados y Nanopartículas Magnéticas”

Doctorado en Ciencias c/m en Química

LISTADO DE PUBLICACIONES EN LOS ÚLTIMOS 10 AÑOS.

Barra, P.A, Barraza, L. Jiménez, V. Gavín, J. and Alderete, "J.B. *Drug-dendrimer supramolecular complexation studied from molecular dynamics simulations and NMR spectroscopy*"

STRUCTURAL CHEMISTRY DOI 10.1007/s11224-014-0424-4 (2014).

Jiménez, V. Alderete, J.B. and Navarrete, K. "Structural insight into epothilones antitumor activity based on the conformational preferences and tubulin binding modes of epothilones A and B obtained from molecular dynamics simulations" **JOURNAL OF BIOMOLECULAR**

STRUCTURE AND DYNAMICS DOI: 10.1080/07391102.2014.911702 (2014)

Barraza, L. Jiménez, V. Gavín, J. and Alderete, "J.B. *Complexation of mefenamic acid by low-generation PAMAM dendrimers: Insight from NMR spectroscopy studies and molecular dynamics simulations*" **MACROMOLECULAR CHEMISTRY AND PHYSICS 215, 372-383 (2014)**

Medina F, Aguila S, Baratto M.C, Martorana A, Basosi R, Alderete J.B, Vázquez-Duhalt R. "Prediction model based on decision tree analysis for laccase mediators". **ENZYME AND MICROBIAL TECHNOLOGY. 52, 68-76 (2013).**

Aguila S, Vidal-Limon A.M, Alderete J.B , Sosa-Tores M, Vázquez-Duhalt R. "Unusual activation during peroxidase reaction of a cytochrome c variant", **JOURNAL OF MOLECULAR CATALYSIS B-ENZYMATIC 85, 187-192 (2013)**

Barraza, L. Jiménez, V. Gavín, J. and Alderete, J.B. "Diffusion coefficients of first-generation polyamidoamine dendrimer and its β -cyclodextrin conjugate in aqueous solution by means of molecular dynamics simulations" **MONATSHFTE FUR CHEMIE 143, 29-35 (2012)**

Jiménez, V., Gavín J, and Alderete, J.B. *"Scaling trend in diffusion coefficients of low generation G0-G3 PAMAM dendrimers in aqueous solution at high and neutral pH"* **STRUCTURAL CHEMISTRY 23, 123-128 (2012).**

Arlette Mena, Joel Alderete, Sergio Aguila, Alain Marty, Alfonso Miranda, Agustín López-Munguía, Edmundo Castillo *"Selectivity of Bacillus subtilis levansucrase in the synthesis of phenolic fructosides"*, **JOURNAL OF MOLECULAR CATALYSIS B-ENZYMATIC 70, 41-48 (2011)**

Sergio Aguila, Rafael Vázquez-Duhalt, Cristian Covarrubias, Gina Pecchi and Joel B. Alderete *"Enhancing Oxidation Activity and Stability of Iso-1-cytochrome c and Chloroperoxidase by Immobilization in Nanostructured Supports"*, **JOURNAL OF MOLECULAR CATALYSIS B-ENZYMATIC 70, 81-87 (2011)**

Delgado E.J, Alderete J.B, Jaña G.A. *"Density-functional study on the equilibria in the ThDP activation"* **JOURNAL OF MOLECULAR MODELING 17, 2725-2739 (2011)**

Jana G, Jimenez V , Villa-Freixa J, Prat-Resina X , Delgado E, Alderete JB. *"A QM/MM study on the last two steps of the catalytic cycle of acetohydroxyacid synthase"*. **COMPUTATIONAL AND THEORETICAL CHEMISTRY 966, 159:166, 2011**

Jaña G.A, Alderete J.B, Delgado E.J. *"On the inhibition of AHAS by chlorimuron ethyl: a theoretical study"*. **CHEMICAL PHYSICS LETTERS 516, 239-243 (2011)**

De Souza, A.O., Alderete, J.B., Regazi, P. Melo, P., Ferreira, I., Barata, L., Silva, C. *"Structure activity relationship, acute toxicity and cytotoxicity of antimycobacterial neolignan analogues"* **JOURNAL OF PHARMACY AND PHARMACOLOGY 63, 936-942 (2011)**

Tanaka T, De Acevedo M.B.M, Durán N, Alderete J.B," *Epifano F, Genovese S, Tanaka M, Tanaka T, Curini M, Colorectal Cancer Chemoprevention by Two β -Cyclodextrin Inclusion*

Compounds of Auraptene and 4'-Geranyloxyferulic acid", **INTERNATIONAL JOURNAL OF CANCER**, **126**, 830-840 (2010).

Jaña G, Jimenez V, Villa-Freixa J, Prat-Resina X, Delgado E, Alderete J, "Computational study on the carboligation reaction of acetohydroxyacid synthase: New approach on the role of the HETHP- intermediate, Source": **PROTEINS-STRUCTURE FUNCTION AND BIOINFORMATICS**, **78**, 1774-1788, 2010

Silva J, Alarcón J, Aguila S, Alderete JB, "Bioreduction of Some Common Carbonylic Compounds Mediated by Yeast". **ZEITSCHRIFT FÜR NATURFORSCHUNG SECTION C-A JOURNAL OF BIOSCIENCES**, **65c**, 1-9, 2010.

Águila S, Vázquez-Duhalt R, Tinoco R, Rivera M, Pecchi G. and Alderete JB, "Stereoselective oxidation of R-(+)-limonene by chloroperoxidase from *Caldariomyces fumago*", **GREEN CHEMISTRY**, **2008**, **10**, 647-653 2008.

Alarcón J, Cida E, Lillo L, Céspedes C, Aguila S, Alderete JB, "Biotransformation of Indole Derivatives by Mycelial Cultures", **ZEITSCHRIFT FÜR NATURFORSCHUNG SECTION C-A JOURNAL OF BIOSCIENCES**, **63c**, 82-84, 2008.

Alderete J, Belmar J, Parra M, Zarraga M, Zuniga C, "Synthesis and mesomorphic properties of 3-(4-n-alkyloxyarylaminomethylene)chroman-2,4-diones", **LIQUID CRYSTALS**, **35**, 157-162, 2008

Jiménez V, Alderete JB, "Correlation Models for the Inclusion Complexation of Aliphatic Compounds with α - and β -Cyclodextrins", **SUPRAMOLECULAR CHEMISTRY**, **20**, 317-325, 2008.

Jimenez V, Alderete JB, "Hartree-Fock and density functional theory study of alpha-cyclodextrin conformers", **JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A**, **112**, 678-685, 2008

L. Lillo, J. Alarcon, G. Cabello, S. Aguila, J. B. Alderete, "Structural studies of native *Paecilomyces* sp exopolysaccharide", **Z. Naturforsch. Section C-A**, **62**, **623**, (2007).

L. Lillo, J. Alarcon, G. Cabello, S. Aguila, J. B. Alderete, "Production of exopolysaccharides by a submerged culture of an entomopathogenic fungus, *Paecilomyces* sp.", **Z. Naturforsch. C-A**, **62**, **576**, (2007).

Alarcon J, Aguila S, Cornejo F, Alderete J, "Biotransformation of 5 alpha-hydroxy-14-eudesm-11-en-3-one by *Rhizopus nigricans*, *Cunninghamella elegans* and *Mucor plumbeus*", **J. Mol. Catal. B-Enzymatic**, **48**, **23**, (2007).

C. Jimenez, J. Belmar, J. B Alderete, F. S. Delgado, M. Lopez-Rodriguez, O. Peña, M. Julve, C. Ruiz-Perez, "New anionic cobalt complexes using highly hindered bis-amides with varying donor abilities as ligands", **Dalton Transactions**, **21**, **2135**, (2007).

Alarcon J, Foncea L, Aguila S, Alderete JB, "Biotransformation of tryptophan by liquid medium culture of *Psilocybe coprophila* (Basidiomycetes)", **Z. Naturforsch. C-A**. **61(11-12)**, **806**, (2006).

V. Jimenez, J. Alderete, "Complete basis set calculations on the tautomerism and protonation of triazoles and tetrazoles", **J. Mol. Struct.Theochem**, **775(1-3)**, **1**, (2006).

V. Jimenez, J. B. Alderete, E. J. Delgado, J. Belmar, J. Gavin, "On the complexation of allopurinol with beta-cyclodextrin", **Struct. Chem.** **17(2)**, **217**, (2006).

E. J. Delgado, J. B. Alderete, G. A. Jana, "DFT derived solvation models for organic compounds in alkane solvents". **CHEM. PHYS.** **325(2)**, **220**, (2006).

S. Aguila, J. Alarcon, C. Conejeros, J. B. Alderete. "Regio and stereoselective hydroxylation of 5a-hydroxy-14-eudesm-11-en-3-one eudesmane by biotransformation of *Rhizopus nigricans*", **J. Chil. Chem. Soc.** **51(2)**, **855**, (2006).

J. Alarcon, J. B. Alderete, A. Aguila, M. G. Peter, *"Regio and stereoselective hydroxylation of alpha-agarofuran by biotransformation of rhizopus nigricans"*, **J Chil. Chem. Soc.** **50 (4)**, 715, (2005).

V. Jimenez, J. B. Alderete, *"Theoretical calculations on the tautomerism of uric acid in gas phase and aqueous solution"*, **J. Mol. Struct.Theochem**, **755(1-3)**, 209, (2005).

A. O. De Souza, J. B. Alderete, A. Faljoni-Alario, C. L. Silva, N. Duran, *"Physico-chemical characterization of the inclusion complex between a 2-propen-1-amine derivative and beta-cyclodextrin"*, **J. Chil. Chem. Soc.** **50(3)**, 59, (2005).

J. Flores, V. Jimenez, J. Belmar, H. D. Mansilla, J. B. Alderete, *"Inclusion complexation of phenol derivatives with a beta-cyclodextrin based polymer"*, **J. Inclus. Phenom. Mol.** **53(1-2)**, 63, (2005).

V. Jimenez, J. B. Alderete, *"The role of charge transfer interactions in the inclusion complexation of anionic guests with alpha-cyclodextrin"*, **Tetrahedron**, **61(23)**, 5449, (2005).

M. Parra, P. Hidalgo, J. Barbera, J. Alderete, *"Properties of thermotropic liquid crystals induced by hydrogen bonding between pyridyl-1,2,4-oxadiazole derivatives and benzoic acid, 4-chlorobenzoic acid or 4-methylbenzoic acid"*, **Liquid Crystals**, **32 (5)**, 573, (2005).

M. Parra, P. Hidalgo, J. Alderete, *"New supramolecular liquid crystals induced by hydrogen bonding between pyridyl-1,2,4-oxadiazole derivatives and 2,5-thiophene dicarboxylic acid"*, **Liquid Crystals**, **32(4)**, 449, (2005).

J. Belmar, F. R. Perez, J. Alderete, C. Zuniga, *"Synthesis and tautomeric studies of enamines from 1-(n-hexyl)-3-methyl-2-pyrazolin-5-one"*, **J. Braz. Chem. Soc.** **16(2)**, 179, (2005).

A. O. De Souza, M. T. C. Pedrosa, J. B. Alderete, A. F. Cruz, M. A. F. Prado, R. B. Alves, C. L. Silva, *"Cytotoxicity, antitumoral and antimycobacterial activity of tetrazole and oxadiazole derivatives"*, **Pharmazie**, **60(5)**, **396**, (2005).

M. Parra, J. Vergara, J. Alderete, C. Zuniga, *"Synthesis and mesomorphic properties of esters derived from Schiff's bases containing 1,3,4-thiadiazole"*, **Liquid Crystals**, **31(11)**, **1531**, (2004).

E. Estrada, E. J. Delgado, J. B. Alderete, G. A. Jana, *"Quantum-connectivity descriptors in modeling solubility of environmentally important organic compounds"*, **J.Comput. Chem.** **25(14)**, **1787**, (2004).

L. M. A. Pinto, M. B. de Jesus, E. de Paula, A. C. S. Lino, J. B. Alderete, H. A. Duarte, Y. Takahata, *"Elucidation of inclusion compounds between beta-cyclodextrin/local anaesthetics structure: a theoretical and experimental study using differential scanning calorimetry and molecular mechanics"*, **J. Mol. Struct. Theochem**, **678(1-3)**, **63**, (2004)

Delgado EJ, Alderete JB, Matamala AR, Jana GA, *"On the aggregation state and QSPR models. The solubility of herbicides as a case study"*, **J. Chem. Inf. Comp. Sci.** **44(3)**, **958**, (2004).

LISTADO DE PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN EN LOS ÚLTIMOS 10 AÑOS

✓ FONDECYT 104.04.63

"Modelos QSPR para la inclusión de heterociclos aromáticos en ciclodextrinas".

Investigador Principal: J. Alderete

Co-Investigador: A. Matamala, E. Delgado

Período: Marzo 2004 - Marzo 2008.

✓ MECESUP UCO-087

“Renovación de Equipamiento Mayor y Mejoramiento de los Estándares de Formación en el programa de Doctorado en Ciencias con Mención en Química de la Universidad de Concepción”.

Director: Joel Alderete

Co-Director: Julio Belmar

Participantes: Verónica Jiménez, Claudio Jiménez

Período: Noviembre 2009- Noviembre 2011

✓ CONACYT-CONICYT 2008-123 Cooperación Internacional

“Estudio del proceso de autoinactivación de peroxidasas: combinando la ingeniería de proteínas con la química computacional”

Investigador Responsable (Chile): J. Alderete

Investigador Responsable (México): R. Vásquez-Duhalt

Co-investigadores: V. Jiménez, M. Ayala

Período: Junio 2009- 2011

✓ FONDECYT 1080282

“Structure-property relationships for the complexation of organic guests with cyclodextrin-dendrimer conjugates”

Nombre investigador principal: Joel Alderete

Nombre co-investigador(es): Verónica Jiménez, Eduardo Delgado

Período: marzo 2008-marzo 2012

✓ FONDECYT 1120250

“Structure-property relationships for the complexation of organic guests with cyclodextrin-dendrimer conjugates”

Nombre investigador principal: Verónica Jiménez

Nombre co-investigador(es):, Joel Alderete

Período: marzo 2012-marzo 2015

✓ FONDECYT 1130531

“Host -guest chemistry of conjugate PAMAM dendrimer nanocarriers”

Nombre investigador principal: Joel Alderete

Nombre co-investigador(es): Verónica Jiménez

Período: marzo 2013-marzo 2017

✓ CONICYT-CONACYT PCC130043

“Inmovilización de enzimas del tipo óxidorreductasas en nanopartículas magnéticas y su aplicación en química ambiental”

Investigador Responsable (Chile): J. Alderete

Investigador Responsable (México): S. Águila

Co-investigadores: R. Vásquez-Duhalt, V. Jiménez

Período: Junio 2014- Junio 2015