

Curriculum Vitae

Fabiola E. Medina Narváez

[famedina\(at\)ubiobio.cl](mailto:famedina(at)ubiobio.cl)

Web Personal: <http://ciencias.ubiobio.cl/famedina/index.html>

ORCID: <http://orcid.org/0000-0002-0230-8717>

Scopus Author ID: 57200591025 **Loop profile:** 837784 **Research ID:** O-7168-2015

Mi investigación científica se centra en la catálisis enzimática computacional, la dinámica de proteínas y la mutagénesis computacional, en particular el modelado molecular mediante métodos QM/MM y simulaciones de dinámica molecular (MD). El objetivo es comprender mejor las funciones y aplicaciones de las enzimas tanto en el área de la biomedicina como de la biotecnología.

ÍNDICE

| | | |
|-----|--|---|
| 1 | EXPERIENCIA PROFESIONAL | 2 |
| 2 | EDUCACIÓN | 2 |
| 3 | PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN | 2 |
| 4 | PUBLICACIONES | 3 |
| 5 | PRESENTACIONES | 4 |
| 5.1 | Presentaciones Orales | 4 |
| 5.2 | Poster en Conferencia | 5 |
| 5.3 | Charlas de Divulgación | 6 |
| 5.4 | Tesis/Disertación | 6 |
| 6 | ACTIVIDADES DE INVESTIGACIÓN | 6 |
| 6.1 | Arbitraje de Artículos | 6 |
| 6.2 | Organización de Eventos | 7 |
| 6.3 | Participación en Eventos | 7 |
| 6.4 | Tutorías | 7 |
| 6.5 | Estadías de Investigación | 8 |
| 7 | EXPERIENCIA DOCENTE | 8 |
| 8 | INFORMACIÓN ADICIONAL | 8 |

1. EXPERIENCIA PROFESIONAL

Académica Jornada Completa (Asistente B), enero 2022 - hasta la fecha
Universidad del Bío-Bío, Concepción, Chile

Posición postdoctoral, abril 2020 - diciembre 2021
Universidad Andrés Bello, Concepción, Chile

2. EDUCACIÓN

Ph. D. in Sustainable Chemistry, abril 2015 - marzo 2019
Universidad de Porto, Porto, Portugal

Magíster en Química, agosto 2009 - marzo 2012
Universidad de Concepción, Concepción, Chile

Profesor de Ciencias Naturales y Química, marzo 2004 - enero 2009
Universidad de Concepción, Concepción, Chile

- Formación Continua

- Ciencias Mujeres Mentoras y Académicas del Territorio Sur- Subantártico, 40 hours, May - June **2022**.
Ciencia para la Innovación Consorcio Sur-Subantártico 2030 (Ci2030), Universidad del Bío-Bío, Chile.
 - Diplomado en docencia especialista primer año, 100 horas, septiembre - noviembre **2021**.
Universidad Andrés Bello, Chile.
 - Educación Híbrida UBB-Concepción II, 20 horas, agosto **2021**.
Universidad del Bío-Bío, Chile.
 - Curso Inicial de Aulas Virtuales: Blackboard, julio **2020**.
Universidad Andrés Bello, Chile.
-

3. PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN

- **Subvención a la Instalación en la Academia N° SA77210061** (Investigadora Responsable), enero 2022 - enero 2025, Universidad del Bío-Bío, Chile.
Organización financiadora: Agencia Nacional de Investigación y Desarrollo (ANID), Chile.

- **Proyecto FONDECYT postdoctorado N° 3200304** (Investigadora Responsable), abril 2020 - enero 2022, Universidad Andrés Bello, Chile.
Organización financiadora: Agencia Nacional de Investigación y Desarrollo (ANID), Chile.
 - **Proyecto Italian SuperComputing Resource Allocation N° HP10CLKB7H** (Co-Investigadora), mayo 2020 - junio 2021, Universidad Andrés Bello, Chile.
Organización financiadora: Italian SuperComputing Resource Allocation (ISCRA) - CINECA, Italia.
 - **Proyecto FONDECYT iniciación N° 11110159** (Personal Técnico), 2012 - 2013, Universidad Andrés Bello, Chile.
Organización financiadora: Comisión Nacional de Investigación Científica y Tecnológica, Chile.
-

4. PUBLICACIONES

14. Sánchez L., **Medina F. E.**, Mendoza F., Febres C. and Jaña G. A., “*Elucidation of the reaction mechanism of *Cavia porcellus* L-Asparaginase (CpA): A QM/MM study*”, *Journal of Chemical Information and Modeling*, **2022**.
13. Orellana, M. S., Jaña G. A., Figueroa M., Martínez-Oyanedel J., **Medina F. E.**, Tarifeño-Saldivia E., Gatica M., García M. A., and Uribe E. A., “*New Insights in the Reaction determinants of specificity in human type I arginase: generation of a mutant that is only active with agmatine as substrate*”, *International Journal of Molecular Science*, **2022**.
12. **F. E. Medina** and Jaña G. A., “*QM/MM Study of VIM-1 metallo- β -lactamase enzyme: Catalytic Reaction Mechanism*”, *ACS Catalysis*, **2022**.
11. Neves, R. P. P., Viegas M., Paiva, P., **F. E. Medina**, Ferreira, P., Sousa J., Ramos, M. J., and Fernandes, P. A., “*Engineering of PKS Megaenzymes – A Promising Way to Biosynthesize High-Value Active Molecules*”, *Topics in Catalysis*, **2021**, 1-19.
10. Paiva, P., **F. E. Medina**, Neves, R. P. P., Viegas, M., Ferreira, P., Sousa J., Ramos, M. J., and Fernandes, P. A., “*Animal Fatty Acid Synthase: A Chemical Nanofactory*”, *Chemical Review*, **2021**.
9. **F. E. Medina** and M. Prejanò, “*Water Molecule allows the intra-molecular activation of Thiamine Di-Phosphate Cofactor in Human Transketolase: Mechanistic Insights on a Famous Proposal*”, *ACS Catalysis*, **2021**, 11, 4136-4145.
8. **F. E. Medina**, M. Prejanò, M. J. Ramos, N. Russo, P. A. Fernandes and T. Marino, “*How the destabilization of a reaction intermediate affects enzymatic efficiency: the case of human Transketolase*”, *ACS Catalysis*, **2020**, 10, 2872-2881.

7. F. Mendoza, **F. E. Medina**, V. A. Jiménez and G. A. Jaña, “Catalytic Role of Gln202 in the Carbonylation Reaction Mechanism of Yeast AHAS: A QM/MM Study”, *Journal of Chemical Information and Modeling*, **2020**, 60, 915-922.
 6. **F. E. Medina**, M. J. Ramos and P. A. Fernandes, “Complexities of the Reaction Mechanisms of CC Double Bond Reduction in Mammalian Fatty Acid Synthase Studied with Quantum Mechanics/Molecular Mechanics Calculations”, *ACS Catalysis*, **2019**, 9, 11404-11412.
 5. M. Prejanò, **F. E. Medina**, P. A. Fernandes, N. Russo, M. J. Ramos and T. Marino, “The Catalytic Mechanism of Human Transketolase”, *ChemPhysChem*, **2019**, 20, 2881-2886.
 4. **F. E. Medina**, R. P. P. Neves, M. J. Ramos and P. A. Fernandes, “QM/MM Study of the Reaction Mechanism of the Dehydratase Domain from Mammalian Fatty Acid Synthase”, *ACS Catalysis*, **2018**, 8, 10267-10278.
 3. **F. E. Medina**, R. P. P. Neves, M. J. Ramos and P. A. Fernandes, “A QM/MM study of the reaction mechanism of human β -ketoacyl reductase”, *Physical Chemistry Chemical Physics*, **2017**, 19, 347-355.
 2. G. A. Jaña, E. J. Delgado, **F. E. Medina**, “How important is the synclinal conformation of sulfonylureas to explain the inhibition of AHAS: a theoretical study”, *Journal of Chemical Information and Modeling*, **2014**, 54, 926-932.
 1. **F. Medina**, S. Aguila, M. C. Baratto, A. Martorana, R. Basosi, J. B. Alderete and R. Vazquez-Duhalt, “Prediction model based on decision tree analysis for laccase mediators”, *Enzyme and Microbial Technology*, **2013**, 52, 68-76.
-

5. PRESENTACIONES

5.1. Presentaciones Orales

10. “Computational tools to elucidate the catalytic mechanism of enzymes with biomedical implications” VI Coloquio de Simulaciones Computacionales en Ciencias, Agosto **2023**, Centro de Nanociencias y Nanotecnología, Universidad Nacional Autónoma de México (Evento Virtual).
9. “Computational Modelling of Metallo-enzymes” Seminarios - UMG, Febrero **2023**, University of Catanzaro, Catanzaro, Italy.
8. “Using computational tools to study the catalytic mechanism of metal-protein Interactions” Seminarios - UMG, Febrero **2023**, University of Catanzaro, Catanzaro, Italy.

7. “Using Computational Tools to Study the Catalytic Mechanism of Enzymes with Biomedical Implications” Seminario - UNICAL, Febrero **2023**, University of Calabria, Calabria, Italy.
6. “Computational Modeling of Metallo-beta-Lactamase Enzyme for QM/MM Calculations”, The Quantum Chemistry and Molecular Modeling Symposium (QCMM), Octubre – **2022**, Universidad de Concepción, Concepción, Chile.
5. “Uso de la mecánica cuántica y mecánica molecular (QM/MM) para el estudio de reacciones catalizadas por enzimas”, Seminarios Facultad de Ciencias, Septiembre – **2022**, Universidad del Bío-Bío, Campus Fernando May, Chillán, Chile.
4. “Computational modeling of Metallo- β -Lactamase enzyme for QM/MM calculations: Catalytic Reaction Mechanism”, 8th Latin American Symposium on Coordination and Organometallic Chemistry (SILQCOM8), Institute of Advanced Materials (INAM) - Universitat Jaume I, Spain, March **2022** (*virtual conference*).
3. “Using Computational Tools to Study the Catalytic Mechanism of Intramolecular Activation of the ThDP Cofactor”, Catalysis and Chemical Engineering **2021** (*virtual conference*), University of South Carolina, USA.
2. “QM/MM study of the Catalytic Mechanism of Human β -ketoacyl Reductase”, UCIBIO Annual Meeting **2018**, Lisboa, Portugal.
1. “QM/MM study of the Reaction Mechanism of the Dehydratase Domain from mFAS”, The Quantum Bio-Inorganic Chemistry (QBIC-IV) **2018**, Bath, Reino Unido.

5.2. *Poster en Conferencia*

6. Medina, F. E.; Neves, R. P. P.; Ramos, M. J.; Fernandes, P. A. **2017**, “QM/MM study of the Catalytic Mechanism of Human β -ketoacyl Reductase”, 11th Triennial Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists (WATOC), Múnich, Alemania.
5. Medina, F. E.; Neves, R. P. P.; Ramos, M. J.; Fernandes, P. A. **2016**, “Catalytic Mechanism of Human β -ketoacyl Reductase: a QM/MM study”, Dynapeutics Scientific School, País Basco, España.
4. Jaña G. A., Medina F. E., **2013**, “On the Inhibition of AHAS by Sulfonylureas: A Theoretical Study”, XXXIX Congress of Theoretical Chemists of Latin Expression (QUITEL), Granada, España.
3. Medina F. E., Rodríguez-Otero J, **2013**, “Computational study of the interaction between halogen anions and heterasumanenes”, XXXIX Congress of Theoretical Chemists of Latin Expression (QUITEL), Granada, España.

2. Jaña G. A., Medina F. E., **2012**, “*Theoretical study for inhibition comprises enzyme aceto-hydroxy acid synthase (AHAS) by herbicides*”, XXXIX Congress of Theoretical Chemists of Latin Expression (QUITEL), Natal, Brasil.
1. Medina F. E. Alderete J. B, **2011**, “*Calculations of redox potentials and pKa DFT laccase mediators*”, XXIX Congreso Chileno de Química, Linares, Chile.

5.3. Charlas de Divulgación

4. “Nociones de Química-Computacional: Estudios sobre reacciones catalizadas por enzimas. Segunda Escuela de Primavera: Magíster en Ciencias Biológicas y Doctorado en Ciencias, Universidad del Bío-Bío, Chile, Octubre **2022**.”
3. “¿Cómo preparar a sus estudiantes para adquirir habilidades de Modelado Computacional?”, Seminario de Formación en Química 2022 (SeFQui22), Universidad del Bío-Bío, Chile, Octubre **2022**. (*Evento dirigido a profesores de enseñanza media*)
2. “La Química en los Procesos de la vida, Experimentos con Computadores para mirar las Moléculas”, Ciclo de Charlas Nodo Gestión del Cambio y Liderazgo Femenino (Ci2030), Charla Online para Colegios del país, Chile, Octubre **2022**.
1. “Química–Teórica y Computacional: con énfasis en sistemas biológicos y aplicaciones biomédica”, I Feria de Ciencia - CATCe 2021, Colegio Adventista Talcahuano Centro, Talcahuano, Chile, Octubre **2021**.

5.4. Tesis/Disertación

3. “*Fatty Acid Synthase - Catalytic Mechanism*” tesis Doctorado, **2019**.
2. “*Diseño de Mediadores Lacasa por métodos Químico Computacionales*” tesis Magíster, **2012**.
1. “*Propuesta proyecto implementación de contenedores para la separación de residuos en las escuelas y taller sobre importancia del reciclaje*” tesis Pedagogía, **2008**.

6. ACTIVIDADES DE INVESTIGACIÓN

6.1. Arbitraje de Artículos

ACS Catalysis (5) - 2021/2022/2023

Journal of Biomolecular Structure and Dynamics (3) - 2020/2021/2023

PLOS One (1) - 2021

Catalysis Science & Technology (2) - 2020

Journal of Chemical Information and Modeling (1) - 2019

6.2. *Organización de Eventos*

1. Comité Organizador de “X Jornadas Chilenas de Catálisis y Adsorción (JCAC)” **2023**.
2. Comité Organizador de “Seminario de Formación en Química (SeFQUI)”, 19 - 21 de octubre **2022**.
Universidad del Bío-Bío, Chile.
3. “9^a Edición del Encuentro de Investigación Joven de la Universidad de Porto (IJUP)”, 17 - 19 febrero **2016**.
Universidad de Porto, Portugal.

6.3. *Participación en Eventos*

4. **Webinar:** El impacto de la detección rápida de carbapenemasas en tiempos de COVID-19, junio **2020**.
Orador: Fernando Pasterán, Laboratorio Nacional de Referencia para Resistencia antimicrobiana, Ministerio de Salud, Argentina.
3. 6th Encuentro de Jóvenes Investigadores de Biología Computacional y Estructural (EJIBCE), diciembre **2018**.
Universidad de Porto, Portugal.
2. Métodos y Aplicaciones en Química Computacional (MACC), septiembre **2017**.
Universidad de Coimbra, Portugal.
1. Bioquímica Computacional: Métodos y Aplicaciones, febrero **2013**.
Universidad de Concepción, Chile.

6.4. *Tutorías*

2. “A Statistical Approach to Extremozyme Adaptation and Enhancing the Efficiency of a Thermostable Endoglucanase in Biofuel Production”, 2018.
Estudiante de Magíster: Tiago Gesto S., Universidad de Porto, Portugal.
1. “How the Destabilization of a Reaction Intermediate Affects Enzymatic Efficiency: Human Transketolase”, abril 2017 - septiembre 2017.
Estudiante Doctorado: Mario Prejanò (Universidad de Calabria, Italia), Universidad de Porto, Portugal.

6.5. *Estadías de Investigación*

- Grupo Profesora Dra. Adriana Pietropaolo, enero - febrero 2023.
Universidad de Catanzaro, Italia.
 - Grupo Profesora Dra. María J. Ramos y Dr. Pedro A. Fernandes, “*Fatty Acid Synthase: an Amazing Chemical Nanofactory*”, enero - febrero 2020.
Universidad de Porto, Portugal.
 - Grupo Profesor Dr. Jesús Rodríguez Otero, “*Computational study of the interaction between halogen anions and heterasumanene*”, enero - abril 2013.
Universidad de Santiago de Compostela, España.
-

7. EXPERIENCIA DOCENTE

- Termodinámica Química (210017), Marzo 2023 - Agosto 2023
 - Química General II (210016) y Química (210014), Septiembre 2022 - Enero 2022
 - Química General I (210015) and Química General (210020), Marzo 2022 - Agosto 2022
 - Química General II (210016), Agosto 2021 - Enero 2022
Universidad del Bío-Bío, Concepción, Chile
 - Química General y Orgánica, Marzo 2019 - Agosto 2020
Universidad Andrés Bello, Concepción, Chile
 - Química, Marzo 2014 - Diciembre 2014
Universidad San Sebastián, Concepción, Chile
 - Química General, Marzo 2013 - Diciembre 2014
Universidad Andrés Bello, Concepción, Chile
 - Química General y Estructura Atómica, Marzo 2012 - Agosto 2012
Universidad de Concepción, Concepción, Chile
 - Ayudante Química General, Marzo 2006 - Diciembre 2010
Universidad de Concepción, Concepción, Chile
-

8. INFORMACIÓN ADICIONAL

- Premio

PCCP Young Researcher Presentation, **2018**.

Royal Society of Chemistry, University of Bath, Bath, Reino Unido.

- Becas

3. Beca de Doctorado - Becas Chile N° 72140166, **2015 - 2019**.
Comisión Nacional de Investigación Científica y Tecnológica (CONICYT), Chile.
2. Beca de Postgrado 100%, **2009 - 2012**.
Dirección de Postgrado, Universidad de Concepción, Concepción, Chile.
1. Beca Presidente de la República, **2004 - 2008**.
Ministerio de Educación, Gobierno de Chile, Chile.

- Idiomas

Castellano - Lengua materna

Inglés - Usuaria Independiente

Portugués - Usuaria Independiente

- SO y Software

- Linux y Windows

- QM/MM y Dinámica Molecular: Gaussian, AMBER (Assisted Model Building with Energy Refinement), ORCA y GaussView.

- Visualizadores de sistemas moleculares: PyMol y VMD (Visual Molecular Dynamics).

- Programación: Bash Linux, Python (básico), y TCL (básico).

- Preparación de documentos, imágenes y gráficos: LaTeX, Inkscape, Gnuplot, y GIMP (GNU image Manipulation Program).