



PRODUCCION

■ **PUBLICACIONES - Artículos publicados en revistas:**

ZANARDI, MARÍA M.; MARCARINO, MARIBEL O.; SAROTTI, ARIEL M.. Redefining the Impact of Boltzmann Analysis in the Stereochemical Assignment of Polar and Flexible Molecules by NMR Calculations. *ORGANIC LETTERS.*: AMER CHEMICAL SOC. 2020 vol.22 n°. p52 - 56. issn 1523-7060.

MARCARINO, MARIBEL O.; ZANARDI, MARÍA M.; SAROTTI, ARIEL M.. The Risks of Automation: A Study on DFT Energy Miscalculations and Its Consequences in NMR-based Structural Elucidation. *ORGANIC LETTERS.*: AMER CHEMICAL SOC. 2020 vol.22 n°9. p3561 - 3565. issn 1523-7060.

MARCARINO, MARIBEL O.; ZANARDI, MARÍA M.; CICETTI, SOLEDAD; SAROTTI, ARIEL M.. NMR calculations with quantum methods: Development of new tools for structural elucidation and beyond. *ACCOUNTS OF CHEMICAL RESEARCH.*: AMER CHEMICAL SOC. 2020 vol.53 n°9. p1922 - 1932. issn 0001-4842.

ZANARDI, MARÍA MARTA; SORTINO, MAXIMILIANO A.; SAROTTI, ARIEL M.. On the effect of intramolecular H-bonding in the configurational assessment of polyhydroxylated compounds with computational methods. The hyacinthacines case. *CARBOHYDRATE RESEARCH.*: ELSEVIER SCI LTD. 2019 vol.474 n°. p72 - 79. issn 0008-6215.

ZANARDI, M. M.; SAROTTI, A. M.. Cálculos Cuánticos de Resonancia Magnética Nuclear Empleados en el Desarrollo de una Probabilidad para Asignación Estereoquímica. *Energeia*. Rosario: Pontificia Universidad Católica Argentina. 2019 vol.1 n°. p73 - 83. issn 1668-1622.

ZANARDI, MARÍA M.; BIGLIONE, FRANCO A.; SORTINO, MAXIMILIANO A.; SAROTTI, ARIEL M.. General Quantum-Based NMR Method for the Assignment of Absolute Configuration by Single or Double Derivatization: Scope and Limitations. *JOURNAL OF ORGANIC CHEMISTRY*. Washington: AMER CHEMICAL SOC. 2018 vol.83 n°19. p11839 - 11849. issn 0022-3263.

ZANARDI, M. M.; SAROTTI, A. M.. Simulación Bidimensional de RMN acoplada con reconocimiento de patrones vis redes neuronales: Una poderosa herramienta de validación estructural. *Energeia*. Rosario: Facultad de Química e Ingeniería del Rosario UCA. 2017 vol.14 n°14. p100 - 107. issn 1668-1622.

ZANARDI, M. M.; SUÁREZ, A. G.; SAROTTI, A. M.. Determination of the Relative Configuration of Terminal and Spiroepoxides by Computational Methods. Advantages of the Inclusion of Unscaled Data. *JOURNAL OF ORGANIC CHEMISTRY*. Washington: AMER CHEMICAL SOC. 2017 vol.82 n°4. p1873 - 1879. issn 0022-3263.

MARÍA M. ZANARDI; ALEJANDRA G. SUÁREZ. Synthesis of new chiral 1,3-aminoalcohols derived from levoglucosenone and their application in asymmetric alkylations. *TETRAHEDRON LETTERS*. Amsterdam: PERGAMON-ELSEVIER SCIENCE LTD. 2015 vol.56 n°. p3762 - 3765. issn 0040-4039.

MARIA M. ZANARDI; ARIEL M. SAROTTI. GIAO C-H COSY Simulations Merged with Artificial Neural Networks Pattern Recognition Analysis. Pushing the Structural Validation a Step Forward. *JOURNAL OF ORGANIC CHEMISTRY*. Washington: AMER CHEMICAL SOC. 2015 vol.80 n°. p9371 - 9378. issn 0022-3263.

GRIMBLAT, NICOLÁS; ZANARDI, MARÍA MARTA; SAROTTI, ARIEL MARCELO. Beyond DP4: an improved probability for the stereochemical assignment of isomeric compounds using quantum chemical calculations of NMR shifts. *JOURNAL OF ORGANIC CHEMISTRY*. Washington: AMER CHEMICAL SOC. 2015 vol.50 n°. p12526 - 12534. issn 0022-3263.

ZANARDI, M. M.; BOTTA, M. C.; SUÁREZ, A. G.. New chiral 1,2-aminoalcohols derived from biomass and their application in diethyl zinc additions. *TETRAHEDRON LETTERS*. Amsterdam: PERGAMON-ELSEVIER SCIENCE LTD. 2014 vol.55 n°42. p5832 - 5835. issn 0040-4039.

LAURA A. SVETAZ; MELINA G. DI LIBERTO; MARÍA M. ZANARDI; ALEJANDRA G. SUÁREZ ; SUSANA A. ZACCHINO. Efficient Production of the Flavoring Agent Zingerone and of both (R)- and (S)-Zingerols via Green Fungal Biocatalysis. Comparative Antifungal Activities between Enantiomers. *INTERNATIONAL JOURNAL OF MOLECULAR SCIENCES*. Basel: MOLECULAR DIVERSITY PRESERVATION INTERNATIONAL-MDPI. 2014 vol.15 n°12. p22042 - 22058. issn 1422-0067.

SAROTTI, A. M.; ZANARDI, M. M.; SPANEVELLO, R. A.; SUÁREZ, A. G.. Recent Applications of Levoglucosenone as Chiral Synthon. *CURRENT ORGANIC SYNTHESIS*. Oak Park: BENTHAM SCIENCE PUBL LTD. 2012 vol.9 n°4. p439 - 459. issn 1570-1794.

ZANARDI, M. M.; SUÁREZ, A. G.. Synthesis of a simple chiral auxiliary derived from



levoglucosenone and its application in a Diels–Alder reaction. *TETRAHEDRON LETTERS*. Amsterdam: PERGAMON-ELSEVIER SCIENCE LTD. 2009 vol.50 n°. p999 - 1002. issn 0040-4039.

■ **PUBLICACIONES - Partes de libro:**

SUÁREZ, A. G.; SPANEVELLO, R. A.; SAROTTI, A. M.; ZANARDI, M. M.; MUNICIPALIDAD DE ROSARIO. *Reciclado de papel de desecho para la obtención de productos de alto valor agregado*. Rosario Metropolitana. Estudios de una región en desarrollo.. Rosario: Municipalidad de Rosario. 2008. p39 - 46. isbn 978-950-664-110-8

■ **PUBLICACIONES - Trabajos en eventos c-t publicados:**

ZANARDI, M. M.; MARCARINO, M. O.; SAROTTI, A. M.. EFECTO DE LOS ENLACES DE HIDRÓGENO EN LA ASIGNACIÓN ESTEREOQUÍMICA DE PIRROLIZIDINAS POLIHIDROXILADAS POR MÉTODOS COMPUTACIONALES. Argentina. San Luis. 2019. Libro. Resumen. Simposio. XXII SIMPOSIO NACIONAL DE QUÍMICA ORGÁNICA. Sociedad Argentina de Investigación en Química Orgánica

MARCARINO, M. O.; ZANARDI, M. M.; SAROTTI, A. M.. DESARROLLO DE NOVEDOSAS METODOLOGÍAS COMPUTACIONALES PARA LA ASIGNACIÓN ESTEREOQUÍMICA DE SISTEMAS POLIHIDROXILADOS. Argentina. San Luis. 2019. Libro. Resumen. Simposio. XXII SIMPOSIO NACIONAL DE QUÍMICA ORGÁNICA. Sociedad Argentina de Investigación en Química Orgánica

ZANARDI, M. M.; BIGLIONE, F. A.; SORTINO, M. A.; SAROTTI, A. M.. ALCANCES Y LIMITACIONES DEL EMPLEO DE DP4+ EN LA ASIGNACIÓN DE CONFIGURACIÓN ABSOLUTA MEDIANTE RMN. Argentina. Ciudad Autónoma de Buenos Aires. 2018. Libro. Resumen. Taller. IV Taller de Resonancia Magnética. Fundación Insituto Leloir

ZANARDI, M. M.; SUÁREZ, A. G.; SAROTTI, A. M.. MÉTODO COMPUTACIONAL SIMPLE Y CONFIABLE PARA DETERMINAR LA CONFIGURACIÓN RELATIVA DE EPÓXIDOS TERMINALES Y ESPIROEPÓXIDOS. Argentina. Bahía Blanca. 2017. Revista. Resumen. Simposio. XXI SIMPOSIO NACIONAL DE QUÍMICA ORGÁNICA. SAIQO

BOTTA, M. C; COMBA, M. B. ; GEROSA, G. G.; ZANARDI, M. M.; MANGIONE, M. I.; SAROTTI, A. M.; SPANEVELLO, R. A.; SUÁREZ, A. G.. INNOVACIÓN EN EL APROVECHAMIENTO DE MATERIALES CELULÓSICOS. México. México DF. 2015. Libro. Resumen. Simposio. 8° Simposio Internacional de Química en Microescala y 5° Taller Internacional de Química Verde.

ZANARDI, M. M.; SAROTTI, A. M.. SIMULACIÓN BIDIMENSIONAL DE RMN ACOPLADA CON RECONOCIMIENTO DE PATRONES VÍA REDES NEURONALES: UNA PODEROSA HERRAMIENTA DE VALIDACIÓN ESTRUCTURAL. Argentina. CABA. 2015. Libro. Resumen. Simposio. XX Simposio Nacional de Química Orgánica. SAIQO

GRIMBLAT, N.; ZANARDI, M. M.; SAROTTI, A. M.. DESARROLLO DE UNA NUEVA PROBABILIDAD PARA LA ASIGNACIÓN ESTEREOQUÍMICA DE COMPUESTOS ISOMÉRICOS UTILIZANDO CÁLCULO DE RMN. Argentina. CABA. 2015. Revista. Resumen. Simposio. XX Simposio Nacional de Química Orgánica. SAIQO

ZANARDI, M. M.; BOTTA, M. C; SUÁREZ, A. G.. Síntesis de aminoalcoholes quirales derivados de levoglucosenona y estudio de su capacidad inductiva en reacciones asimétricas. Argentina. Buenos Aires. 2010. Libro. Resumen. Congreso. XXVIII Congreso Argentino de Química y 4° Workshop en Química Medicinal. Asociación Química Argentina

BOTTA, M. C; ZANARDI, M. M; LLOMPART, D. F.; CORNE, V.; SPANEVELLO, R. A.; SUÁREZ, A. G.. Aprovechamiento de biomasa en la obtención de productos innovadores. Argentina. Santa Fe. 2010. Libro. Resumen. Jornada. XVIII Jornadas de Jóvenes Investigadores de la Asociación de Universidades Grupo Montevideo. AUGM

ZANARDI, M. M.; SUÁREZ, A. G.. Obtención de nanopartículas de Pd mediante la oxidación de alcoholes alílicos en ausencia de solvente. Argentina. Buenos Aires. 2009. Libro. Resumen. Simposio. XVII Simposio Nacional de Química Orgánica. Sociedad Argentina de Investigaciones en Química Orgánica

ZANARDI, M. M.; BOTTA, M. C; SUÁREZ, A. G.. Estudio de alquilaciones asimétricas catalizadas por aminoalcoholes derivados de levoglucosenona. Argentina. Buenos Aires. 2009. Libro. Resumen. Simposio. XVII Simposio Nacional de Química Orgánica. Sociedad Argentina de Investigaciones en Química Orgánica

ZANARDI, M. M.; LLOMPART, D. F.; BOTTA, M. C; SPANEVELLO, R. A.; SUÁREZ, A. G.. Desarrollo de catalizadores quirales derivados de levoglucosenona y su aplicación en síntesis asimétrica. Argentina. Rosario. 2009. Libro. Resumen. Workshop. 1st Argentinean Workshop in



Environmental Science.

ZANARDI, M. M.; SUÁREZ, A. G.. Chiral amino alcohols derived from levoglucosenone and their application in asymmetric alkylations. Brasil. Sao Pedro. 2009. Libro. Resumen. Encuentro. 13th Brazilian Meeting on Organic Synthesis.

FRINCHABOY, A.; ZANARDI, M. M.; LLOMPART, D.; SAROTTI, A. M.; SUÁREZ, A. G.; SPANEVELLO, R. A.. Papel de desecho como fuente de innovación química. Uruguay. Montevideo. 2008. Libro. Artículo Completo. Jornada. XVI Jornadas de Investigadores Jóvenes. Asociación de Universidades Grupo Montevideo

ZANARDI, M. M.; SUÁREZ, A. G.. Análisis de los factores estructurales que afectan la capacidad de estereoinducción de catalizadores quirales derivados de levoglucosenona. Argentina. Libro de resúmenes. 2008. Libro. Artículo Completo. Congreso. XXVII Congreso Argentino de Química Dr. Pedro José Aimonino. Asociación Química Argentina

ZANARDI, M. M.; SAROTTI, A. M.; SUÁREZ, A. G.; SPANEVELLO, R. A.. Highly efficient chiral inductors derived from biomass. Uruguay. Book of Abstracts. 2008. Libro. Resumen. Workshop. IFS/OPCW Workshop: "Chemistry in nature- Natural resources: Chemical, Biological and environmental aspects".. IFS y OPCW

ZANARDI, M. M.; SUÁREZ, A. G.. Síntesis de nuevos ligandos quirales a partir de levoglucosenona y su aplicación en reacciones enantioselectivas. Argentina. Buenos Aires. 2007. Libro. Resumen. Simposio. XVI Simposio Nacional de Química Orgánica. Sociedad Argentina de Investigación en Química Orgánica

ZANARDI, M. M.; LLOMPART, D.; SUÁREZ, A. G.. Estudio de los factores estructurales de 1,2-amino alcoholes que afectan la enantioselectividad en reacciones de alquilación asimétricas. Argentina. Libro de resúmenes. 2007. Libro. Resumen. Simposio. XVI Simposio Nacional de Química Orgánica. Sociedad Argentina de Investigación en Química Orgánica

ZANARDI, M. M.; SUÁREZ, A. G.. Chiral amino alcohols derived from biomass and their application in asymmetric synthesis. Brasil. Itapema. 2007. Libro. Resumen. Congreso. 12th Brazilian Meeting on Organic Synthesis. The Brazilian Chemical Society

ZANARDI, M. M.; SAROTTI, A. M.; SPANEVELLO, R. A.; SUÁREZ, A. G.. Análisis de los factores estructurales que afectan la capacidad de estereoinducción de auxiliares quirales derivados de levoglucosenona. Argentina. Libro de resúmenes. 2006. Libro. Resumen. Congreso. XXVI Congreso Argentino de Química-Dr. Ángel del Carmen Devia. Asociación Química Argentina

ZANARDI, M. M.; SUÁREZ, A. G.. Biomasa como fuente de materia prima quiral en la obtención de compuestos de alto valor agregado. Argentina. Buenos Aires. 2005. Libro. Resumen. Simposio. XV Simposio Nacional de Química Orgánica. SAIQO

■ **PUBLICACIONES - Tesis:**

Universitario de posgrado/doctorado. *Desarrollo de ligandos quirales a partir de biomasa y su aplicación en reacciones orgánicas enantioselectivas*. Dra. en Ciencias Químicas. UNIVERSIDAD NACIONAL DE ROSARIO (UNR). 0. Español