

Pharmaceutical and Biotechnological
Innovation-Services SAS de CV

www.pharbiois.com



Registro RENIECYT-CONAHCYT: 2000001

Curso de dinámica molecular proteína-ligando



Clases asincrónicas por www.Rcampus.com

Profesor

Dra Gema Lizeth Ramírez Salinas, SNI-1
<https://scholar.google.com/citations?user=YYPRn0cAAAAJ&hl=es>

Inicia: 17 de junio del 2024

Duración: 12 horas

Fresno Norte No 14. San Miguel Tehuisco, Alcaldia Tlalpan C.P.14500
pharmacologicalandbiotechnology@gmail.com



Acerca del curso

Este curso te permitirá aprender conceptos sobre estructura de proteínas, ligandos, campos de fuerza, e interacciones no covalentes proteína-ligando, cambios conformacionales, preparar tu sistema para correr dinámica molecular proteína-ligando, correr tu simulación, analizar tus resultados cómo rmsd, Rg, rmsf, interacciones no covalentes proteína-ligando, cálculo de energía, etc.

Temario

Unidad I: Conceptos básicos sobre proteínas (3 horas)

1. Proteínas
 - i. Las proteínas
 - ii. Importancia de las proteínas como biomoléculas
 - iii. Propiedades y clasificación de los aminoácidos
 - iv. Niveles estructurales de las proteínas
 - v. Relación estructura y función en las proteínas

Unidad II: Dinámicas Moleculares proteínas-ligando (6 horas)

1. Aplicación de la dinámica molecular para el estudio de biomoléculas
2. Conceptos sobre dinámicas moleculares
 - a. Definición de dinámica molecular
 - b. Descripción general de la metodología
 - c. Campo de fuerza y parámetros
 - d. Algoritmos
 - e. Condiciones periódicas
 - f. Controles de temperatura y presión
3. Introducción al programa NAMD
4. NAMD como paquete de dinámica molecular
 - a. Generalidades sobre NAMD
 - b. Generación del sistema de simulación
 - c. Análisis de la estructura inicial
 - d. Neutralización de la carga del sistema
 - e. Solvatación del sistema de simulación



- f. Establecimiento de la rutina de simulación
 - g. Descripción de las fases de un algoritmo de simulación
 - h. Generación de archivos de entrada (inputs) para la simulación
 - i. Hacer ejercicio para correr una dinámica corta
5. Proteína-Ligando.

Unidad III: Análisis de las Dinámicas moleculares (6 horas)

1. Análisis de simulaciones con Carma
2. Introducción a Carma
 - a. Descripción de un archivo de entrada
 - b. Cálculo y análisis de Desviación cuadrática media (RMSD)
 - c. Cálculo y análisis de Radio de giro (RG)
 - d. Cálculo y análisis de Fluctuación cuadrática media (RMSF)
 - e. Agrupamiento de estructuras
 - f. Cálculo y análisis de componentes principales (PCA)
 - g. Cálculo de energía libre de los ligandos en Dinámica molecular
3. Análisis de datos de dinámica proteína-ligando con VMD

Inversión: \$ **1,499.00** MXN (85.2 USD). Para inscribirse, pago en cuenta CLABE SANTANDER: 0141-8065-5079-1315-04 a nombre de Pharmaceutical and Biotechnological Innovation Services SAS De CV. El comprobante se manda al correo: pharmaceuticalandbiotechnology@gmail.com. También puedes pagar en la página <https://bit.ly/3QgEXTG> con **PayPal (+ 5%) o Mercado Pago (OXO, TDD, TDC) y stripe**, Hay descuentos: 10 % (alumnos de licenciatura), 5% (alumnos de posgrado y posdocs) y 5% (si has tomado cursos en www.pharbiois.com).