

Pharmaceutical and Biotechnological  
Innovation-Services SAS de CV

www.pharbiois.com



Registro: RENIECYT-CONAHCYT: 2000001

# Curso: Dinámica molecular proteína-membrana

Validez oficial/curricular red SEP-CONOCER EC0301

Clases asincrónicas en <https://pharbiois.milaulas.com/> (acceso inmediato)

**Profesor:** Dr Jorge Luis Rosas Trigueros, SNI-1

<https://www.researchgate.net/profile/Jorge-Rosas-Trigueros>

**Inicio:** 17 de agosto del 2025

Duración: 15 horas



Fresno Norte No 14. San Miguel Tehuisco, Alcaldia Tlalpan C.P.14500  
[pharmacologicalandbiotechnology@gmail.com](mailto:pharmacologicalandbiotechnology@gmail.com)



## Acerca del curso

Este curso te proporcionará los conocimientos fundamentales sobre la estructura de proteínas y su relevancia en un entorno lipídico, especialmente para proteínas transmembranales. Aprenderás a insertar una proteína en una membrana y a ejecutar una dinámica molecular de un sistema con estas características. Además, realizarás el análisis de resultados clave, como RMSD, radio de giro (Rg), RMSF, interacciones no covalentes proteína-lípido y cambios conformacionales. Para aprovechar este curso al máximo, es recomendable contar con conocimientos previos en estructura terciaria de proteínas, membranas lipídicas y manejo básico de Linux en modo texto.

# TEMARIO

Presentación del módulo y examen diagnóstico

Unidad I: Conceptos básicos sobre proteínas ( 3 horas)

1. Proteínas

- Las proteínas
- Importancia de las proteínas como biomoléculas
- Propiedades y clasificación de los aminoácidos
- Niveles estructurales de las proteínas
- 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



- Definición de dinámica molecular
  - Descripción general de la metodología
  - Campo de fuerza y parámetros
  - Algoritmos
  - Condiciones periódicas
  - Controles de temperatura y presión
3. Introducción al programa NAMD (NAMD como paquete de dinámica molecular)
- Generalidades sobre NAMD
  - Generación del sistema de simulación
  - Análisis de la estructura inicial
  - Neutralización de la carga del sistema
  - Solvatación del sistema de simulación
  - Establecimiento de la rutina de simulación
  - Descripción de las fases de un algoritmo de simulación
  - Generación de archivos de entrada (inputs) para la simulación
  - Hacer ejercicio para correr una dinámica corta
4. Proteína-Ligando.

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

1. Análisis de simulaciones con Carma
2. Introducción a Carma
  - Descripción de un archivo de entrada
  - Cálculo y análisis de Desviación cuadrática media( RMSD)
  - Cálculo y análisis de Radio de giro (RG)
  - Cálculo y análisis de Fluctuación cuadrática media (RMSF)
  - Agrupamiento de estructuras
  - Cálculo y análisis de componentes principales (PCA)



- Cálculo de energía libre de los ligandos en Dinámica molecular
3. Análisis de datos de dinámica proteína-ligando con VMD

COSTO, \$ **1,499.00** MXN (85.6 USD). Para inscribirse, pago en cuenta CLABE SANTANDER: 0141-8065-5079-1315-04 a nombre de Pharmaceutical and Biotechnological Innovation Services SAS De CV.. También puedes pagar en <https://bit.ly/3FaewPR> con **PayPal (+ 5%)**, MERCADO PAGO (TDD, TDD, OXO, etc) o stripe. El comprobante se manda al correo: [pharmaceuticalandbiotechnology@gmail.com](mailto:pharmaceuticalandbiotechnology@gmail.com). Descuentos: alumnos de licenciatura 10%, posgrado y posdocs 5%, haber tomado otro curso en pharbios.com 5%.