

Registro RENIECYT-SECIHTI: 2000001

Curso de dinámica molecular proteína-ligando

Validez oficial/curricular de red SEP-CONOCER EC0301 y EC0366



Clases asincrónicas por <https://pharbiois.milaulas.com/>

Profesor

Dr Jorge Luis Rosas Trigueros SNI-1

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

Inicia: En cualquier momento

Duración: 20 horas

Acerca del curso

Este curso te proporcionará conocimientos clave sobre la estructura de proteínas y ligandos, incluyendo campos de fuerza, interacciones no covalentes proteína-ligando y cambios conformacionales. Aprenderás a preparar un sistema para ejecutar una dinámica molecular proteína-ligando, llevar a cabo simulaciones y analizar resultados esenciales como RMSD, radio de giro (R_g), RMSF, interacciones no covalentes y cálculo de energía, entre otros. Para un mejor aprovechamiento del curso, se recomienda tener experiencia en el sistema operativo Linux en modo texto.

Temario

Presentación del módulo y examen diagnóstico

Unidad I: Conceptos básicos sobre proteínas y membranas (3 horas)

1. Biomoléculas

1. Importancia de las membranas como biomoléculas
2. Importancia de las proteínas como biomoléculas
3. Propiedades y clasificación de los aminoácidos
4. Niveles estructurales de las proteínas
5. Relación estructura y función en las proteínas

2. Métodos de determinación estructural de proteínas

1. Métodos de determinación estructural

- Cristalografía de rayos X
- Resonancia magnética nuclear
- Cryo-electro microscopía.
- Instalación de VMD, NAMD y CARMA (asincrónico)

Unidad II: Dinámicas Moleculares de proteínas transmembranales (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

Unidad III: Introducción a los programas de dinámica molecular

1. NAMD
2. Amber
3. Gromacs

1. NAMD como paquete de dinámica molecular

1. Generalidades sobre NAMD
2. 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
 - Correr simulación de DM con NAMD en sus computadoras (continuar asincrónico)

Unidad IV: 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)

Pharmaceutical and Biotechnological Innovation-Services SAS de CV



- 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)
- Análisis de la estructura y dinámica de la membrana

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).