



Registro: RENIECYT-CONAHCYT: 2000001

Curso: Dinámica molecular proteína-membrana

Validez oficial/curricular red SEP-CONOCER ECO301

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

Profesor: Dra. Gema Lizbeth Ramírez Salinas, SNI-1

<https://scholar.google.com/citations?user=YYPRn0cAAAAJ&hl=es>

Inicio: 17 de marzo del 2025

Duración: 15 horas





Acerca del curso

Este curso te permitirá aprender conceptos sobre estructura de proteínas, además de la importancia de las proteínas en un entorno lipídico para todas aquellas proteínas transmembranales, harás ejercicios para insertar la proteína en membrana y correr una dinámica de un sistema con estas características además de analizar tus resultados cómo RMSD, Rg, RMSF, interacciones no covalentes proteína, cambios conformacionales, etc. Para realizar este curso se requiere tener conocimientos en estructura terciaria de proteínas, conocimientos en membranas lipídicas, manejo básico de linux en modo texto.

TEMARIO

Presentación del curso y examen diagnóstico

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

1. Biomoléculas
 - a. Importancia de las membranas como biomoléculas
 - b. Importancia de las proteínas como biomoléculas
 - c. Propiedades y clasificación de los aminoácidos
 - d. Niveles estructurales de las proteínas
 - e. Relación estructura y función en las proteínas
2. Métodos de determinación estructural de proteínas
 - a. Métodos de determinación estructural
 - i. Cristalografía de rayos X
 - ii. Resonancia magnética nuclear
 - iii. Cryo-electro microscopía.
 - iv. Instalación de VMD, NAMD y CARMA (asincrónico)



Unidad II: Dinámicas Moleculares proteínas transmembranales (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

Unidad III: Introducción a los programas de dinámica molecular

- g. NAMD
 - h. Amber
 - i. Gromacs
3. NAMD como paquete de dinámica molecular
 - a. Generalidades sobre NAMD
 - b. Generación del sistema de simulación
 - i. Análisis de la estructura inicial
 - ii. Neutralización de la carga del sistema
 - iii. Solvatación del sistema de simulación
 - iv. Establecimiento de la rutina de simulación
 - v. Descripción de las fases de un algoritmo de simulación
 - vi. Generación y preparación de archivos de entrada (inputs) para la simulación.
 - vii. 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
 - 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)

Pharmaceutical and Biotechnological Innovation-Services SAS de CV

www.pharbiois.com



- d. Cálculo y análisis de Fluctuación cuadrática media (RMSF)
- e. Agrupamiento (clusters) de estructuras
- f. Cálculo y análisis de componentes principales (PCA)

Nota: Se califica con actividades en rcampùs.com (70%) y ejercicio final (30%), la constancia se entrega con calificación numérica de 1-10.

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. Descuentos: alumnos de licenciatura 10%, posgrado y posdocs 5%, haber tomado otro curso en pharbios.com 5%.