

Curso: Dinámica Molecular de Proteínas en Medio Acuoso

Acerca de este curso

La dinámica molecular (DM) es una técnica computacional fundamental para el estudio de proteínas, que posibilita la simulación y el análisis detallado de su comportamiento y evolución estructural a lo largo del tiempo. Este curso tiene como objetivo introducir a los participantes en la aplicación de DM a proteínas en medios acuosos, cubriendo tanto los principios teóricos como su aplicación práctica en los campos farmacéutico y biotecnológico.

Durante el curso, se abordarán temas clave como la estructura de las proteínas, los campos de fuerza (force fields) y los conceptos básicos de la dinámica molecular, incluyendo el desplazamiento medio cuadrático (RMSD), la fluctuación del desplazamiento medio cuadrático (RMSF), el radio de giro (R_g) y las superficies accesibles al solvente. Asimismo, se detallarán los procedimientos necesarios para realizar simulaciones de dinámica molecular, abarcando desde la preparación de archivos y la minimización de estructuras hasta la configuración y ejecución de simulaciones utilizando el software NAMD.

Para enriquecer el aprendizaje teórico, se realizarán ejercicios prácticos con herramientas especializadas como VMD y CARMA, que ayudan en la visualización y análisis de resultados. Estas sesiones permitirán a los participantes interpretar los datos de las simulaciones, enfocándose en los cambios conformacionales y la estabilidad estructural, habilidades fundamentales para quienes buscan aplicar la dinámica molecular en el

desarrollo de nuevos fármacos o en la optimización de procesos biotecnológicos.

Este curso proporciona una formación integral, que abarca desde la introducción a los conceptos fundamentales hasta la aplicación práctica y el análisis exhaustivo de resultados. Al final, se llevará a cabo una actividad integradora en la que se aplicarán los conocimientos adquiridos. Con esta experiencia, los participantes estarán más preparados para utilizar la dinámica molecular en proyectos de investigación o desarrollo en el ámbito de las ciencias de la vida.

Perfil del aprendiz

Este curso está destinado a profesionales y estudiantes de disciplinas relacionadas con las ciencias biológicas, farmacéuticas y biotecnológicas, que deseen aprender y aplicar la dinámica molecular (DM) en el análisis de proteínas. Los participantes deben tener conocimientos básicos de biología molecular y química, así como habilidades en el uso de herramientas computacionales fundamentales.

Modalidad

Acceso inmediato a los contenidos del curso tras la inscripción, a través de las plataformas www.rcampus.com y <https://pharbiois.milaulas.com>.

Se ofrecen 30 horas de contenido grabado que se pueden seguir de manera asincrónica, junto con material seleccionado, como artículos científicos y vídeos de expertos en la materia.

Este curso está diseñado para completarse en un plazo de cinco semanas, pero su modalidad asincrónica y el acceso ilimitado durante un año permiten a los participantes avanzar según su disponibilidad y revisar los temas cuando lo necesiten.



El acompañamiento personalizado de nuestros instructores estará disponible de forma continua a lo largo de la duración del curso.

Al completar al menos el 80% de las actividades del curso, recibirán una certificación tras evaluar la calidad en el curso y la atención brindada por Pharbiois a través de las plataformas de Survey Monkey en <https://www.surveymonkey.com/r/J2WYNVX> y Google Maps en <https://g.page/r/CRpW33pcN6YZEBM/review>, o por correo electrónico a la dirección ventas@pharbiois.com, con el asunto “Opinión Dinámica Molecular PHC03”.

Validez

La certificación de este curso cuenta con respaldo oficial y curricular de la Secretaría de Educación Pública de México, a través de la red SEP-CONOCER, con el estándar de competencia EC0301.

Instructor

Dr. José Correa Basurto



Este curso es impartido en su totalidad por el [Dr. José Correa Basurto](#). El Dr. Correa es Médico, Maestro en Ciencias en Farmacología y Doctor en Investigación Médica por la Escuela Superior de Medicina del Instituto Politécnico Nacional, en México (ESM-IPN). Además, es Maestro en Bioinformática por la Universidad Internacional de Andalucía, en España.

Es Profesor e Investigador a tiempo completo en el Laboratorio de Diseño y Desarrollo de Nuevos Fármacos y Biotecnología de la ESM-IPN. Forma parte

del Sistema Nacional de Investigadoras e Investigadores (SNII) en su nivel más alto, SNII-III, en México. Ha publicado 236 artículos de investigación, 12 capítulos de libro y cuenta con 7 patentes aprobadas en México. Además, actúa como editor y revisor para diversas revistas internacionales de alto impacto en Química Medicinal y Modelado Molecular.

Temario

1. Presentación y examen diagnóstico

1.1. Definición de dinámica molecular (DM)

1.2. Aplicaciones de la DM

2. Estructura de proteínas

2.1. Conceptos de aminoácidos

2.2. Estructura primaria de proteínas

2.3. Estructura secundaria de proteínas

2.4. Estructura terciaria de proteínas

3. Aplicación de dinámica molecular (DM) en el área farmacéutica.

3.1. Definición de receptor

3.2. Definición de ligando

3.3. Interacción ligando-receptor

4. Aplicación de DM en el área biotecnológica

4.1. Nanonacarreadores (dendrimeros)

4.2. Interacción dendrimeros-péptidos

5. Generalidades sobre Campos de Fuerza

5.1. Interacciones no covalentes

5.2. Interacciones covalentes

6. Conceptos (RMSD, RMSF, Rg, superficies accesibles a solvente, cambios conformacionales)



- 6.1. Definición de desviación de la raíz cuadrada media (RMSD)
- 6.2. Definición de la raíz media cuadrática de fluctuación (RMSF)
- 6.3. Definición de radio de giro (Rg)

7. Ejercicios de visualización con VMD

- 7.1. Instalación del programa Visual Molecular Dynamics (VMD):
<https://www.ks.uiuc.edu/Research/vmd/>
- 7.2. Introducción al uso de VMD por medio de ejercicios prácticos de visualización
(<https://www.ks.uiuc.edu/Training/Tutorials/vmd/vmd-tutorial.pdf>)

8. Archivos requeridos para una DM

- 8.1. Archivos de topología
- 8.2. Archivos de parámetros
- 8.3. Archivos myfile.conf para minimizar la estructura proteica calentar, equilibrar y correr simulación

9. Preparación de archivos para correr DM

- 9.1. Instalación del programa Nanoscale Molecular Dynamics (NAMD):
<https://www.ks.uiuc.edu/Research/namd/>
- 9.2. Introducción a NAMD a través de su propia documentación:
<https://www.ks.uiuc.edu/Training/Tutorials/namd-index.html>
- 9.3. Preparación de archivos para el cálculo de una DM
- 9.4. Generación de archivos tipo .pdb y .psf con VMD
- 9.5. Solvatación del sistema y generación de archivos .pdb y .psf
- 9.6. Ionización del sistema y generación de archivos .pdb y .psf

10. Minimización de estructura para DM

- 10.1. Minimización de los archivos .pdb y .psf
- 10.2. Preparación del archivo .conf

11. Simulación de DM en NAMD - Parte 1

- 11.1. Preparación del archivo de minimización de aguas
- 11.2. Minimización de las aguas
- 11.3. Minimización del sistema
- 11.4. Correr simulación NTP para calentamiento y equilibrio

12. Simulación de DM en NAMD - Parte 2

- 12.1. Edición de *scripts* para simulación NTV y producción de la DM

13. Correr simulación NTV para la producción de la DM

- 13.1. Análisis de resultados por VMD
- 13.2. Analizar archivos .psf y .log en VMD
- 13.3. Discusión de los resultados de RMSD, energías, etc.

14. Análisis de resultados por CARMA

- 14.1. Obtener e Instalar el programa CARMA:
<https://utopia.duth.gr/glykos/Carma.html>
- 14.2. Introducción al uso de CARMA a través de su documentación oficial, el manual en: <https://utopia.duth.gr/glykos/pdf/carma.pdf>

15. Continuación de análisis de resultados por CARMA.

- 15.1. Obtener los valores de RMSD
- 15.2. Obtener los valores de RMSF
- 15.3. Obtener los valores de Rg
- 15.4. Obtener diferentes .pdb (*snapshots*)

16. Actividad final: realizar ejercicio de dinámica molecular usando proteína de su interés

- 16.1. Avanzar en el proyecto final de forma independiente con acompañamiento remoto
- 16.2. Compartir los resultados de su modelado y análisis a la plataforma de evaluación

Instrucciones de registro

1. Realiza tu inversión a través de las plataformas disponibles en: <https://www.pharbiois.com/inscribirmedinamicamolecularproteinaagua>
2. Envía el comprobante de pago a ventas@pharbiois.com con el asunto “Inscripción Dinámica Molecular PHC03” (si requieres factura, incluye tu Constancia de Situación Fiscal).
3. Recibirás por correo electrónico toda la información necesaria para acceder a las sesiones grabadas.

Descuentos disponibles

En Pharbiois, creemos firmemente en la importancia de contribuir a la educación de la juventud mexicana y latinoamericana. Por ello, ofrecemos descuentos especiales para los siguientes grupos:

- Estudiantes de Licenciatura o Pregrado, del 10%
- Estudiantes de Posgrado, del 5%
- Antiguos estudiantes de Pharbiois, del 5%
- Referidos por antiguos estudiantes de Pharbiois, del 5%
- Asistentes a la Masterclass Gratuita de Dinámica Molecular de Proteínas en Medio acuoso, del 20%

Si eres elegible para alguno de estos descuentos, envíanos un correo a ventas@pharbiois.com con el asunto “Descuento Dinámica Molecular PHC03”.

Conoce todos nuestros productos y servicios

Congreso anual de Divulgación y Emprendimiento en Innovación CDEI

Organizado en colaboración con Pharbiois, este evento reúne a expertos en ciencia, tecnología e innovación para explorar y compartir avances en salud, biotecnología y emprendimiento científico. Con conferencias magistrales, talleres especializados y espacios de *networking*, el CDEI fomenta la

colaboración interdisciplinaria, brindando una experiencia enriquecedora para profesionales y estudiantes. Más información: <https://www.pharbiois.com/2docdei>.

Cursos y Diplomados en Farmacéutica Computacional

Conoce nuestros más de 25 Cursos y 6 Diplomados respaldados por la Secretaría de Educación Pública de México (SEP) a través de la red SEP-CONOCER. Más información: <https://www.pharbiois.com>.

Servicios de Apoyo a la Investigación

Entendemos que los recursos computacionales, el tiempo y el aprendizaje de nuevas técnicas pueden ser factores limitantes en la investigación. Por ello, ofrecemos servicios especializados para la comunidad científica, realizados por expertos y garantizados por Pharbiois.

- Análisis bioestadísticos
- Simulaciones de acoplamiento (*docking*) y dinámica molecular
- Alquiler de tiempo y capacidad de cómputo
- Redacción de patentes
- Diseño y desarrollo de proyectos de investigación
- Edición de figuras creativas y técnicas
- Traducción y corrección de textos al inglés
- Asesoría para emprendedores

Más información: <https://www.pharbiois.com/consultoria-y-servicios> o al correo electrónico: ventas@pharbiois.com.