

**UNIVERSIDAD VERACRUZANA**  
**Doctorado en Investigación Químico-Biológica**

DATOS GENERALES
Nombre del Curso
<b>Modelado Molecular</b>

PRESENTACIÓN GENERAL
<b>Justificación</b>
<p>El modelado molecular es una técnica computacional que permite estudiar la interacción que existe entre una molécula y su blanco, mediante el empleo de métodos computacionales que representen las estructuras y comportamiento de las moléculas. De esta forma, se logra predecir la estructura de una molécula a y si esta puede unirse a un receptor, y por lo tanto si puede ser un punto de partida para el diseño experimental. Se ha evidenciado la importancia del modelado molecular a raíz de la pandemia por infección con el virus SARS-Cov2, al tener que generar o rediseñar medicamentos y realizar mejores diagnósticos; la simulación molecular por computadora, acortó los tiempos y está apoyando no solo a la ciencia básica, sino a la clínica misma.</p>

OBJETIVOS GENERALES DEL CURSO Y UNIDAD DE COMPETENCIA
<b>OBJETIVO</b> <b>Conocer y aplicar las herramientas computacionales básicas para el modelado y la visualización de moléculas de interés biológico.</b> Al final la EE el estudiante será capaz de usar los programas y plataformas computacionales que se emplean para modelar biomoléculas y para analizar fenómenos biológicos relacionados con los procesos patológicos.

UNIDADES, OBJETIVOS PARTICULARES TEMAS
<b>UNIDAD 1</b>
Herramientas de los servidores
<b>Objetivos particulares</b>
Hacer uso de metaservidores para analizar secuencias y estructuras de proteínas.
<b>Temas</b>
1.1. Genecards Suite ( <a href="https://www.genecards.org/">https://www.genecards.org/</a> )
1.2. Protein Data Bank ( <a href="https://www.rcsb.org/">https://www.rcsb.org/</a> )
1.3. UniProtKB/Swiss-Prot ( <a href="https://www.uniprot.org/uniprot/V5BT91">https://www.uniprot.org/uniprot/V5BT91</a> )
1.4. ChemSpider ( <a href="http://www.chemspider.com/">http://www.chemspider.com/</a> )
1.5. NCBI ( <a href="https://www.ncbi.nlm.nih.gov/search/all/">https://www.ncbi.nlm.nih.gov/search/all/</a> )

<b>UNIDAD 2</b>
<b>Herramientas en línea para generar y evaluar modelos por homología</b>
<b>Objetivos particulares</b>
<b>El estudiante aplicará las herramientas necesarias para generar modelos 3D a partir de secuencias de proteínas y ácidos nucleicos.</b>
<b>Temas</b>
<p>2. 1 I-Tasser (<a href="https://zhanglab.ccmb.med.umich.edu/I-TASSER/">https://zhanglab.ccmb.med.umich.edu/I-TASSER/</a>)</p> <p>2.2 SAVES v5.0 (<a href="https://servicesn.mbi.ucla.edu/SAVES/">https://servicesn.mbi.ucla.edu/SAVES/</a>)</p> <p>2. 3. Visualizadores en línea y locales</p> <p>2.4 Jena 3DViewer (<a href="http://jena3d.leibniz-fli.de/">http://jena3d.leibniz-fli.de/</a>)</p> <p>2.5 1cn3D (<a href="https://www.ncbi.nlm.nih.gov/Structure/icn3d/full.html">https://www.ncbi.nlm.nih.gov/Structure/icn3d/full.html</a>)</p> <p>2.6 PyMOL ( <a href="https://pymol.org/2/">https://pymol.org/2/</a>)</p> <p>2.7 YASARA (<a href="http://www.yasara.org/downloads.htm">http://www.yasara.org/downloads.htm</a>)</p> <p>2.8 Swiss-PdbViewer, SPDV (<a href="https://spdbv.vital-it.ch/disclaim.html">https://spdbv.vital-it.ch/disclaim.html</a>)</p> <p>2.9 RasMol (<a href="http://www.openrasmol.org/">http://www.openrasmol.org/</a>)</p>
<b>UNIDAD 3</b>
<b>Herramientas de servidores de acoplamiento molecular</b>
<b>Objetivos particulares</b>
<b>El estudiante generará modelos para conocer y evaluar las interacciones intra e intermoleculares entre las proteínas.</b>
<b>Temas</b>
<p>3.1 ClusPro (<a href="https://cluspro.bu.edu/login.php?redir=/queue.php">https://cluspro.bu.edu/login.php?redir=/queue.php</a>)</p> <p>3.2 Flex PepDock (<a href="http://flexpepdock.furmanlab.cs.huji.ac.il/">http://flexpepdock.furmanlab.cs.huji.ac.il/</a>)</p> <p>3.3 Acoplamiento molecular proteína-ligando</p> <p>3.4 -SwissDock (<a href="http://www.swissdock.ch/docking">http://www.swissdock.ch/docking</a>)</p> <p>3.5 -Autodock (<a href="http://autodock.scripps.edu/">http://autodock.scripps.edu/</a>)</p> <p>3.6 Interpretación de resultados del acoplamiento molecular</p>
<b>UNIDAD 4</b>
<b>Bases de la dinámica molecular</b>
<b>Objetivos particulares</b>
<b>El estudiante conocerá las bases teóricas de la dinámica molecular.</b>

## Temas

4.1 Utilidad de los programas: **NAMD, DL\_POLY, LAMMPS, y GROMACS para dinámica molecular.**

4.2 Utilidad de los programas **NWChem, Gaussian y Crystal** para cálculos cuánticos de estructura electrónica, para determinar geometrías moleculares y parámetros del potencial de interacción, y para realizar simulaciones de tipo BOMD.

4.2 Utilidad de los paquetes computacionales de visualización **MOLDEN y VMD.**

## TÉCNICAS DIDÁCTICAS Y ASPECTOS METODOLÓGICOS

- Uso de herramientas en la creación de ambientes virtuales de aprendizaje.
- Exposición con apoyo tecnológico variado. Debates. Lectura comentada. Ilustraciones.
- Mapas conceptuales. Resúmenes. Clases virtuales con la plataforma Eminus. Uso de bibliografía internacional. Uso de redes sociales para fomentar la colaboración internacional.

## EQUIPO NECESARIO

- Laptop o Computadora de escritorio
- Red de internet
- Plataforma Eminus

## BIBLIOGRAFÍA

- Leach AR (2009). Molecular modelling : principles and applications. Pearson PrentiHall. ISBN 978-0-582-38210-7. OCLC 635267533.
- Heinz H, Ramezani-Dakhel H (January 2016). "Simulations of inorganic-bioorganic interfaces to discover new materials: insights, comparisons to experiment, challenges, and opportunities". Chemical Society Reviews. **45** (2): 412-48. doi:10.1039/C5CS00890E. PMID 26750724.
- Parsons J, Holmes JB, Rojas JM, Tsai J, Strauss CE (July 2005). "Practical conversion from torsion space to Cartesian space for in silico protein synthesis". Journal of Computational Chemistry. **26** (10): 1063–8. doi:10.1002/jcc.20237. PMID 15898109. S2CID 2279574.
- Lee J, Cheng X, Swails JM, Yeom MS, Eastman PK, Lemkul JA, et al. (January 2016). "CHARMM-GUI Input Generator for NAMD, GROMACS, AMBER, OpenMM, and CHARMM/OpenMM Simulations Using the CHARMM36 Additive Force Field". Journal of Chemical Theory and Computation. **12** (1): 405–13. doi:10.1021/acs.jctc.5b00935. PMC 4712441. PMID 26631602

**REFERENCIAS ELECTRÓNICAS (Última fecha de acceso)**

Shamoon Ahmad Siddiqui (2020) Molecular modelling and simulation for the design of molecular diodes using density functional theory, Molecular Simulation, 46:6, 460-467, DOI: 10.1080/08927022.2020.1726913

**EVALUACIÓN****SUMATIVA**

<b>Aspecto a Evaluar</b>	<b>Forma de Evaluación</b>	<b>Evidencia</b>	<b>Porcentaje</b>
1.Participación en el “salón de clases de Eminus”	Rúbrica	Chat y video de la clase	10
2.Informes del uso de herramientas electrónicas , software y simuladores	Rúbrica	Documento escrito	50
3.Exposición de temas en el aula individual y grupal	Rúbrica	Documento de autoevaluación y evaluación grupal	20
Exámenes parciales y final	Exámenes en plataforma eminus	Respuestas al examen	20
Total			100