

Curso Teórico Práctico: “Modelado Molecular de Proteínas” 2017

Organizado por: Centro de Fisiología Celular e Integrativa del Instituto de Ciencias e Innovación en Medicina (ICIM)

Fecha: miércoles 17, jueves 18 y viernes 19 de enero de 2018.

Lugar: AU 203, Facultad de Medicina Clínica Alemana Universidad del Desarrollo (Avda. Las Condes 12.438, Lo Barnechea).

Objetivos:

1. Entender la teoría, conceptos y terminología *básicos* del modelado molecular con énfasis en temas tales como:

Modelado comparativo
Mecánica Molecular
Minimización y Dinámica Molecular
Acoplamiento Molecular (Docking)
Cálculos de energía libre (MM-GBSA)
Determinación de farmacóforo
Dinámica molecular aleatoriamente acelerada (RAMD)

2. Ser capaces de realizar algunas actividades *básicas* de modelado molecular, como por ejemplo:

Modelado comparativo a través de servidores web
Preparación de sistemas para ejecutar una simulación molecular (minimización y dinámica molecular)
Análisis de la dinámica molecular y visualización de proteínas usando el Programa VMD (Visual Molecular Dynamics)

Destinado a:

- Investigadores de diferentes áreas de las Ciencias Biológicas y médicas que necesiten herramientas bioinformáticas y modelado molecular
- Bioinformáticos
- Estudiantes de doctorado y postdoctorandos

Realizado por: Dra. Wendy González, Directora del Centro de Bioinformática y Simulación Molecular (CBSM), de la Universidad de Talca. Núcleo Milenio de Enfermedades Asociadas a Canales Iónicos (MiNICAD)

Más información sobre la Dra. Gonzalez, aquí:

<https://scholar.google.com/citations?user=G4pdVO4AAAAJ&hl=es>
https://www.researchgate.net/profile/Wendy_Gonzalez

Quienes se inscriban en el curso, deben instalar el siguiente programa en sus computadores personales:

<http://www.ks.uiuc.edu/Research/vmd/>

Además, deben contar en dichos computadores con acceso a internet.

Por favor, para inscribirse apretar el siguiente link:

[Inscripciones](#)

Información de contacto: Sr. Mauricio Retamal Phd. mretamal@udd.cl

Programa

Miércoles 17 de enero

Horario	Tema	Expositor
9:00 – 9:30	Inscripción y registro	
10:00 – 11:30	Modelado Comparativo	Dra. Wendy González
11:30 – 13:00	Mecánica Molecular	Dra. Wendy González
13:00 – 14:00	Almuerzo	
14:00 – 16:00	Taller: Modelado comparativo a través de servidores web	Dra. Wendy González Dr (c). Mauricio Bedoya

Jueves 18 de enero

Horario	Tema	Expositor
10:00 – 12:30	Minimización, Dinámica molecular y Acoplamiento Molecular (Docking)	Dra. Wendy González
12:30 – 14:00	Almuerzo	
14:00 – 16:00	Cálculos de Energía Libre (MM-GBSA)	Dra. Wendy González
15:00 – 16:00	Determinación de farmacóforo y Dinámica Molecular aleatoriamente acelerada (RAMD)	Dra. Wendy González

Viernes 19 de enero

Horario	Tema	Expositor
10:00 – 12:30	Taller: Preparación de sistemas para ejecutar una simulación molecular (minimización y dinámica molecular)	Dra. Wendy González Dr (c). Mauricio Bedoya
12:30 – 14:00	Almuerzo	
14:00 – 16:00	Análisis de la dinámica molecular y visualización de proteínas usando el Programa VMD (Visual Molecular Dynamics)	Dra. Wendy González Dr (c). Mauricio Bedoya