De: **Enrique Garcia Hernandez** egarciah@unam.mx
Asunto: Re: [SC_UNAM] Miztli. Renovacion. Formatos Propuestos
Fecha: 2 de febrero de 2017, 14:53
Para: depto@super.unam.mx

EH

Hola,

Envío el reporte del proyecto código SC16-2-IR-4. Este semestre no solicité renovación.
Por favor, si se requiere alguna información adicional, háganmelo saber. Espero acuse de recibido. Muchas gracias.
Saludos
Enrique García
Instituto de Química

==========
REPORTE

1. Título.

Bases Energético-Estructurales del Funcionamiento de Proteínas con Arquitectura Modular

2. Resumen (1 o 2 párrafos).
En este proyecto, se propone el estudio de tres sistemas proteicos de arquitectura multimodular de relevancia biomédica y biotecnológica, a saber: la ATP sintasa, la beta-lactoglobulina y la proteína odorante bovina (OBP). Si bien se trata de sistemas complejos, con cada uno de ellos es posible realizar análisis con diferente grado de integración, ya que cada proteína es susceptible de ser "disecada" en subcomponentes que, por otra parte, conservan propiedades valiosas para descifrar el comportamiento global de la molécula. En particular, se solicita apoyo de supercómputo para realizar distintos tipos de cálculo que van desde obtener y analizar trayectorias de dinámica molecular de los sistemas proteicos en estudio, hasta la realización de acoplamientos masivos de moléculas orgánicas sobre las proteínas en sitios identificados como "drugables" mediante mediciones de solvatación preferencial por dinámica molecular. Cabe mencionar que en nuestro grupo tenemos experiencia previa en el uso de herramientas de dinámica molecular. Los resultados obtenidos nos han permitido indagar sobre la flexibilidad conformacional y la solvatación de las proteínas estudiadas. En este proyecto, pretendemos expandir los objetivos de estudio, tratando de elucidar mecanismos de comunicación a distancia, así como incursionar por primera vez en el diseño de unidores tipo fármaco.

3. **Breve descripción de avances** (1 cuartilla).
Durante este semestre se realizaron simulaciones de dinámica molecular de los tres sistemas proteicos a estudiar. En todos los casos, fueron dinámicas en solvente explícito de larga duración (100 ns), sin restricciones. Las trayectorias resultantes fueron descargadas a servidores de cómputo locales, las cuales fueron analizadas con ccptraj (módulo gratuito de ambertools) para realizar alineamientos, cálculos de flexibilidad conformacional (RMSD, RMSF), solvatación (tiempos de residencia, mapas de energía de interacción). Se usaron cajas tanto de agua pura como de mezclas agua/etanol.

4. Cálculos realizados (1 cuartilla).
Se realizaron cálculos en gpu con el programa pmemd.cuda perteneciente a la suite amber14

5. Software utilizado.
AMBER14

6. Recursos utilizados.
GPU's

7. Lista de colaboradores.

Alumnos inscritos en programa de doctorado (UNAM):

1. Guillermo Salcedo Barrientos (Ciencias Bioquímicas),
2. Christian Axel Luviano Jardón (Biomédicas),
3. Eduardo Leyva Hernández (Ciencias Bioquímicas),
4. Homero Gómez Velasco (Ciencias Biomédicas),
5. Alfonso Labra Núñez (Biológicas),
6. Jorge Luis Medrano Cerano (Ciencias Bioquímicas),
7. Sara Abigail Ramírez Cortés (Ciencias Biomédicas),
8. Manuel Bernardo García Curiel (Ciencias Biomédicas),
9. Mayte Cossio Ayala (Ciencias Biomédicas),
10. Luis Pablo Ávila Barrientos (Ciencias Bioquímicas).
11. Otto Hahn Herrera (Ciencias Químicas)

Alumno inscrito en programa de maestría (UNAM):

1. Luis Fernando Cofas Vargas (Ciencias Bioquímicas).
2. Mario Trejo Pérez (Ciencias Bioquímicas).
3. Itzel López González (Ciencias Bioquímicas).
4. Roberto Cruz Castañeda (Ciencias Bioquímicas).

Alumnos inscritos en licenciatura (UNAM):

1. Ana Carolina Anzures Mendoza (Facultad de Ciencias),
2. Miguel Angel Medina Gómez (Facultad de Ciencias),

Estancia posdoctoral:

1. Paola Mendoza Espinosa (egresada del Instituto de Fisiología Celular, UNAM).

8. Lista de artículos publicados.
Ninguno durante estos seis meses. En proceso de preparación 1 artículo.

9. Lista de alumnos graduados.
Otto Hahn Herrera. Doctorado en Ciencias Químicas. Noviembre de 2016

10. Lista de congresos nacionales e internacionales y participantes.
XXXI Congreso Nacional de Bioquímica. 2016. Eduardo Leyva Hernández, Christian Axel Luviano Jardón, Mario Trejo Pérez, Itzel López González, Roberto Cruz Castañeda. Enrique García Hernández

El 16/01/2017 a las 03:08 p.m., Yolanda Flores escribió:

> Estimados usuarios de la supercomputadora Miztli.
>
> Por causas ajenas a nosotros aún no están disponibles los formatos para su reporte y plan de trabajo, pero les envío la información que éstos deben contener.
>
> Ya está activa la liga en la pagina de renovación.
>
> Saludos

--

Enrique García-Hernández

Departamento de Química de Biomacromoléculas
Instituto de Química
Universidad Nacional Autónoma de México
Circuito Exterior, Ciudad Universitaria
México, D. F. 04360
México

Tel: (+52) 55 56 22 44 24
Fax : (+52) 55 56 16 22 03
e-mail: egarciah@unam.mx

www.iquimica.unam.mx/index.php/departamentosiq-alias/biomacromoleculasiq-alias?id=118