VNIVERSIDAD NACIONAL
AVTONOMA DE
MEXICO

FACULTAD DE MEDICINA
DEPARTAMENTO DE BIOQUÍMICA

Dirección General de Cómputo y de Tecnologías de Información y Comunicación

A quien corresponda:

Por medio de la presente envío el resumen de las actividades académicas realizadas con los recursos de supercómputo asignados para el proyecto titulado "Estudios teóricos de las interacciones proteína-péptido del sistema calmodulina utilizando dinámica molecular", durante el período comprendido entre los meses de enero de 2016 a enero de 2017.

Se realizaron diversos estudios teórico-computacional a través de acoplamiento molecular y dinámica molecular para estudiar las interacciones de una serie de ligandos de la proteína calmodulina (péptidos, fármacos y compuestos orgánicos), los cuales se compararos con datos experimentales, mismos que se utilizaron para la preparación artículos indexados y para trabajos tanto de estancias estudiantiles como trabajos de tesis de diversos alumnos.

Los resultados obtenidos con los recursos asignados nos han proporcionados datos teóricos importantes para nuestra línea de investigación, ya que estos son comparables con los datos experimentales obtenidos. Lo anterior representa una ventaja con respecto a otros grupos de investigación donde solo se realiza la parte teórica o experimental del estudio de interacciones entre proteínas y ligandos.

Los cálculos realizados con los recursos de supercomputo son principalmente los siguientes: 1) parametrizaciones de moléculas orgánicas (fármacos), utilizando el programa GAUSSIAN con un máximo de 8 procesadores por trabajo; 2) Dinámicas moleculares de interacciones proteína-ligando, utilizando el programa AMBER sobre las tarjetas NVIDIA m2090 y 3) El análisis de las trayectorias de DM utilizando el programa mmpbsa.py parte de AMBERTOOLS.

Los trabajos ejecutados en este periodo fueron 1746 trabajos correspondiente a un consumo de 39381.3 horas nodo. Con lo cual se logró la publicación de los siguientes artículos y la formación de recursos humanos.

Artículos:

1. Velázquez-López I1, León-Cruz E1, Pardo JP1, Sosa-Peinado A1, **González-Andrade M**. Development of new hCaM-Alexa Fluor® biosensors for a wide range of ligands. *Anal Biochem*. **2017** Jan 1;516:13-22.

2. **González-Andrade M***, Rodríguez-Sotres R, Madariaga-Mazón A, Rivera-Chávez J, Mata R, Sosa-Peinado A, Del Pozo-Yauner L, Arias-Olguín II. Insights into molecular interactions between CaM and its inhibitors from molecular dynamics simulations and experimental data. *J Biomol Struct Dyn*. **2016.** 34(1):78-91.

Alumnos graduados

1. CARACTERIZACIÓN DE UNA NUEVA GAMA DE BIOSENSORES FLUORESCENTES DE LA PROTEÍNA CALMODULINA (CAM-ALEXAS), Sustentante Erika León Cruz, 2016

Estancias Estudiantil

1. Adriana Valverde Carcaño, con el proyecto "Estudios teóricos y experimentales de moléculas bioactivas utilizando DM y el biosensor CaM M124C-mBBr", SEMESTRE 2017-1.
2. Natzidielly Vera Monsalvo, con el proyecto "Interacciones moleculares de posibles fármacos utilizando herramientas de modelaje molecular y biosensores", SEMESTRE 2017-1.
3. Cedillo Ramos Alma Susana, con el proyecto "Estudios de modelaje molecular del sistema CaM-péptidos enfocado en el diseño de biofármacos", SEMESTRE 2017-1.

Adicionalmente, los recursos asignados han sido utilizados parcialmente en realizar algunas actividades computacionales para la preparación de material didáctico del curso de posgrado titulado "HERRAMIENTAS DE MODELAJE MOLECULAR APLICADAS A LAS INTERACCIONES BIOMOLECULARES" que impartimos en el programa de Maestría y Doctorado en ciencias Bioquímicas en la Facultad de Química.

Sin más por el momento, y agradeciendo de antemano la atención que se sirva prestar a la presente quedo de usted (es).

ATENTAMENTE
"POR MI RAZA HABLARÁ EL ESPÍRITU"
Ciudad Universitaria, a 17 de enero de 2017.

Dr. Martin González Andrade
Profesor Asociado C, Tiempo Completo
Departamento de Bioquímica,
Facultad de Medicina, UNAM