

7. Temario

Bloque I - Introducción y fundamentos

1. Presentación de los integrantes e instalación de *GROMACS*
2. Tutorial 1: Lisozima en agua (parte I - preparación del sistema)
3. Tutorial 1: Lisozima en agua (parte II - adición de iones, minimización, pre-equilibración)

Bloque II - Ejecución y análisis

4. Tutorial 1: Lisozima en agua (parte III - NVT, NPT y corrida de producción)
5. Análisis con *GROMACS* y *VMD* (parte I - RMSD, RMSF, radio de giro)
6. Uso de *gmx energy* y *Xmgrace*
 - Extracción de energías.
 - Generación e interpretación de gráficas.

Bloque III - Sistemas avanzados

7. Tutorial 2: Proteína en membrana (KALP15 en DPPC, parte I - construcción inicial)
8. Tutorial 2: Proteína en membrana (parte II - inserción en membrana, solvatación)
9. Tutorial 5: Complejo proteína-ligando (parte I - preparación y topología del ligando)
10. Tutorial 5: Complejo proteína-ligando (parte II - inserción y ajustes)

Bloque IV - Herramientas complementarias

11. Uso de *CHARMM-GUI* para construcción de sistemas (proteínas, membranas, complejos)
12. Uso de *Nanomodeler* para modelado de nanopartículas funcionalizadas y exportación a *GROMACS*

Bloque V - Cierre

13. Sesión final con invitado experto, preguntas abiertas y evaluación del taller

8. Cronograma

Fecha	Sesión	Tema
5 septiembre 2025	1	Presentación de integrantes + instalación de <i>GROMACS</i>
12 septiembre 2025	-	(No hay sesión)
19 septiembre 2025	2	Lisozima en agua (I)
26 septiembre 2025	3	Lisozima en agua (II)
3 octubre 2025	4	Lisozima en agua (III)
10 octubre 2025	5	Análisis con <i>GROMACS</i> y <i>VMD</i> (I)
17 octubre 2025	6	Uso de <i>gmx energy</i> y <i>Grace</i>
24 octubre 2025	7	Proteína en membrana (I)
31 octubre 2025	8	Proteína en membrana (II)
7 noviembre 2025	9	Proteína-ligando (I)
14 noviembre 2025	10	Proteína-ligando (II)
21 noviembre 2025	11	Uso de <i>CHARMM-GUI</i>
28 noviembre 2025	12	Uso de <i>Nanomodeler</i>
5 diciembre 2025	13	Invitado experto + cierre

9. Evaluación

- Participación activa en las sesiones.

- Colaboración en la resolución de ejercicios.
- Aportación en discusiones y proyectos grupales.

(No se otorgará calificación numérica; la evaluación es cualitativa y formativa).

10. Bibliografía y recursos

- Lemkul, J.A. (2018) From Proteins to Perturbed Hamiltonians: A Suite of Tutorials for the *GROMACS*-2018 Simulation Package. *Living J. Comp. Mol. Sci.* 1(1): 5068.
- Tutoriales de *GROMACS*: <http://www.mdtutorials.com/gmx/>
- Sitio oficial de *GROMACS*: <http://www.gromacs.org>
- Manual de VMD: <https://www.ks.uiuc.edu/Research/vmd/>
- CHARMM-GUI: <http://www.charmm-gui.org>
- Nanomodeler: <http://www.nanomodeler.com>