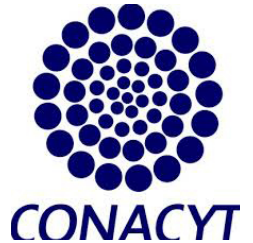


**Red
Estructura
Función y
Evolución de
Proteínas**

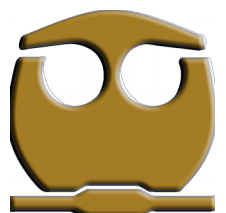


**Taller de Simulación Molecular y Muestreo Acelerado:
Conceptos Básicos y Aplicaciones en el estudio de proteínas**

**12, 13 y 14 de Octubre 2017
Ciudad de México**

**Auditorio E
Facultad de Química
UNAM**

Organizadores:
Laura Domínguez FQ-UNAM
Nina Pastor, UAEM



PROGRAMA:

Hora	Jueves 12 de Octubre
9:00-10:00	Dinámica Molecular e introducción al muestreo acelerado Nina Pastor, UAEM
10:00-11:00	Adrián Roitberg, University of Florida
11:00-11:30	CAFE
11:30-12:30	Coarse grained & Minimal Models Dave Thirumalai, The University of Texas at Austin
12:30-13:00	Multiscale modeling of gamma-Secretase Rodrigo Aguayo, FQ-UNAM
13:00-14:00	Sampling size for molecular modeling: homology and de novo Mauricio Carrillo Tripp, CINVESTAV
14:00-16:00	LUNCH
16:00-16:30	Free energy landscape reconstruction by enhanced sampling methods Marcelino Arciniega, IFC-UNAM
16:30-17:00	Reposicionamiento de fármacos Aldo Segura, INECOL
17:00-17:30	Interacción ligando-proteína desde la dinámica conformacional Alejandro Sosa, FM-UNAM

Hora	Viernes 13 de Octubre
9:00-10:00	TALLER BASICO (Gromacs y Amber) Rodrigo Aguayo, Augusto González, Dulce Guzmán, Guillermo Goode, Alejandro Álvarez
10:00-11:00	
11:00-12:00	
12:00-13:00	John Straub, Boston University
13:00-14:00	Mecanismos de reacción enzimática con DFT Alberto Vela, CINVESTAV
14:00-16:00	LUNCH
16:00-16:30	Lenin Domínguez, UDLA
16:30-17:00	Quantum-mechanics consistent prediction of the substrate-activator-enzyme ternary complex of an inorganic pyrophosphatase from MD simulations and all-atom semiempirical LMO calculations. Rogelio Rodríguez Sotres, FQ-UNAM

Hora	Sábado 14 de Octubre
9:00-12:00	TALLER AVANZADO Coarse Grained - Rodrigo Aguayo AMD - Augusto González pH-REMD - Dulce Guzmán