

Modelado de grano grueso de la proteína ubiquitina y su comparación con la estructura cristalográfica experimental

C. A. Estrada

15 de diciembre de 2020

Resumen

Aquí se va a escribir el resumen del trabajo, al finalizarlo.

Palabras clave: Aquí van.

1. Introducción

Primer párrafo: qué es la ubiquitina y su importancia en la nanobiotecnología.

Siguientes párrafos: describir brevemente (a modo de antecedentes y trabajos relacionados) qué es el modelado de proteínas por coarse-grained y su importancia, así como algunos de los modelos propuestos por dicho método. Descripción del modelo MARTINI que se va a utilizar.

Último párrafo: descripción breve de la utilidad del modelado de la ubiquitina en la nanotecnología, así como de lo estudiado en el presente trabajo.

2. Metodología

Se describen los parámetros utilizados para la implementación de la simulación, el modelo propuesto y se cita apropiadamente el software y herramientas [1] empleados para ello.

3. Resultados y discusión

Agregar la proteína generada por simulación, cálculo de parámetros de calidad (pendiente de

revisar cómo hacerlo).

Comparación y análisis estadístico contra la proteína real (los datos experimentales obtenidos en PDB).

¿Agregar análisis de desempeño computacional durante la simulación?

4. Conclusiones

Agradecimientos

Referencias

- [1] The R Foundation. The R Project for Statistical Computing, 2020.