



FIMDA: Una nueva plataforma para realizar análisis de trayectorias de dinámica molecular para proteínas

Luis Guarneros-Nolasco¹, Ketzasmin A. Terrón-Mejía¹, Norma E. González-Díaz¹, Jorge Mulia-Rodríguez¹, Felipe Rodríguez-Romero¹, Roberto López-Rendón¹

¹Laboratorio de Bioingeniería Molecular a Multiescala, Facultad de Ciencias, Universidad Autónoma del Estado de México, Av. Instituto Literario 100, 50000, Toluca, México

e-mail: luisguarneros@gmail.com

A medida que las simulaciones de dinámica molecular (DM) siguen evolucionando, surge la necesidad de contar con software que permita analizar de una manera fácil, rápida y confiable sus trayectorias. Por lo anterior, hemos desarrollado FIMDA, un paquete de software moderno, rápido y ligero para el análisis de descriptores conformacionales para proteínas. FIMDA lee y escribe datos de trayectorias en una variedad de formatos usados comúnmente por programas de DM. Provee un largo número de funciones de análisis como RMSD, RMSF, B-factors, contactos nativos, mapas de energía libre, puentes de hidrógeno, puentes disulfuro, estructura secundaria, SASA, radio de giro y PCA. FIMDA es una herramienta poderosa y amigable que simplifica el análisis de datos de DM.

[1] <http://www.fimda.uaemex-labs.org.mx/>

[2] Harvey, M.; Giupponi, G.; Fabritiis, G. D. ACEMD: Accelerated molecular dynamics simulations in the microseconds timescale. *J. Chem. Theory Comput.* 2009, 5, 1632.

[3] Humphrey, W.; Dalke, A.; Schulten, K. VMD: visual molecular dynamics. *J. Mol. Graphics* 1996, 14, 33–38.