

Pharmaceutical and Biotechnological
Innovation-Services SAS de CV



Registro RENIECYT-CONAHCYT: 2000001

Curso de acoplamiento molecular (docking) proteína- ligando con ADFR



Profesor: Dr LENIN DOMÍNGUEZ RAMÍREZ, SNI-2
<https://mx.linkedin.com/in/lenin-dominguez-9b852838>

Inicia: 6 de mayo del 2024

100% online: asincrónico (material disponible en todo momento) y sincrónico de
5:00 a 6:00 PM de CDMX, México los días: lunes, miércoles y viernes), 4 semanas (24
horas).

Sistemas operativos: Linux, Mac, Windows

Fresno Norte No 14. San Miguel Tehuisco, Alcaldia Tlalpan C.P.14500
pharmacologicalandbiotechnology@gmail.com

Programa

I. Presentación

A. Interacciones proteína ligando, cambios conformaciones y catálisis

II. Línea de comandos básica

A. Determinar la ubicación de los archivos

B. Listar los archivos

C. Visualización básica

D. Nomenclaturas recomendadas

E. Trabajo remoto

III. Introducción a ADFR

A. ¿Qué es AGFR/ADFR?

B. ¿Por qué ADFR?

C. Ventajas y limitaciones

IV. Obtención de los archivos básicos

A. RCSB, base de datos de proteínas

B. Estructuras determinadas por rayos X

C. UCSF Zinc

1. Estructuras novedosas (Avogadro)

V. Validación energética (Avogadro y UCSF Chimera)

A. Remoción de heteroátomos



- B. Remoción de moléculas de agua
- C. Conformaciones alternativas de cadenas laterales
- D. Fragmentos ausentes y numeración de la secuencia
- E. Minimización de energía (proteínas, UCSF Chimera)
- F. Minimización de energía (ligandos, Avogadro)

VI. Estructura de los archivos de docking

- A. PDBQT de proteína
- B. PDBQT de ligando

VII. Preparación de los archivos de entrada (línea de comandos)

- A. prepare_receptor
- B. prepare_ligand

VIII. AGFRGUI

- A. Receptor
- B. Caja (acoplamiento ciego)
- C. Cavidades
- D. Ligando (acoplamiento dirigido)
- E. Átomos representados en las mallas de docking

IX. Acoplamiento de proteína rígida

- A. ADFR
- B. Nombre del “trabajo”



- C. Número de ejecuciones
- D. Número de evaluaciones
- E. Número de núcleos a usar

X. Controles negativos

- A. ¿Qué son?
- B. ¿Quiénes son?
- C. Limitaciones

XI. Controles positivos

- A. ¿Quiénes son?
- B. Limitaciones

XII. Estadística y convergencia

- A. Análisis y visualización de los resultados

XIII. Acoplamiento de proteína con cadenas laterales flexibles.

- A. ¿Cómo hacerlo?
- B. ¿Por qué hacerlo?
- C. Precauciones

XIV. Análisis visual en UCSF Chimera

- A. Tips y trucos para usar los archivos PDBQT

XV. Actividad Final

Nota: Se califica con actividades en rcampùs.com (70%) y ejercicio final (30%), la constancia se entrega con calificación numérica de 1-10.

Pharmaceutical and Biotechnological Innovation-Services SAS de CV



Inversión: \$ **1,499.00 MXN (85 USD)**. Para inscribirse, enviar Comprobante de pago a cuenta CLABE SANTANDER: 0141-8065-5079-1315-04, a nombre de Pharmaceutical and Biotechnological Innovation Services SAS De CV. El comprobante se manda al correo: pharmaceuticalandbiotechnology@gmail.com. Pagos por PayPal: pharmaceuticalandbiotechnology@gmail.com y en la página <https://bit.ly/40IHINn> por Mercado Pago y Stripe (pagos con TDC a MSI). Tenemos descuentos desde 5-10% a alumnos, profesores de tiempo completo, haber tomado cursos en pharbiois.com