

Pharmaceutical and Biotechnological Innovation-Services SAS de CV

www.pharbiois.com



Registro RENIECYT-CONAHCYT: 2000001

Reposiciónamiento de Fármacos *In Silico*

Constancia con folio de red SEP-CONOCER EC0301 y EC0366 (validez oficial)

Modalidad: 100% asincrónico

Plataforma: <https://pharbiois.milaulas.com/>

Duración: 15 horas

Idioma: Español

Masterclass GRATIS: <https://www.pharbiois.com/contacto>

Inicia: En todo momento: <https://pharbiois.milaulas.com/>

Descripción del curso

El reposicionamiento de fármacos (drug repurposing) se ha convertido en una de las estrategias más eficientes para acelerar el descubrimiento terapéutico, reduciendo tiempos, costos y riesgos asociados al desarrollo tradicional de nuevos medicamentos. Este curso introduce los fundamentos científicos y metodológicos del reposicionamiento utilizando herramientas computacionales gratuitas y accesibles en línea. Dirigido a estudiantes y profesionales de biología, química,

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

Pharmaceutical and Biotechnological Innovation-Services SAS de CV

www.pharbiois.com



farmacia, bioinformática, biomedicina o áreas afines, el programa ofrece una visión clara y práctica del proceso de identificación de nuevas indicaciones terapéuticas mediante análisis *in silico*. No se requiere experiencia previa en programación ni en bioinformática avanzada. A lo largo de 10 horas, los participantes aprenderán a explorar bases de datos biomédicas, analizar estructuras químicas, identificar posibles blancos terapéuticos, realizar análisis básicos de docking molecular con plataformas en línea y evaluar propiedades farmacocinéticas preliminares. Cada sesión incluye objetivos de aprendizaje definidos, ejercicios guiados paso a paso y recursos adicionales para profundización autónoma.

TEMARIO

Temario:

- Introducción al Reposicionamiento de Fármacos. Búsqueda de compuestos en bases de datos (PubChem, ChEMBL, DrugBank, ZINC20).
- Recursos genómicos y análisis comparativo (Introducción a NCBI). Introducción a Python para análisis bioinformático.
- Estructura de *Targets*. RCSB Protein Data Bank. Modelado de proteínas. Modelado por homología con SwissModel. Predicción *de novo* con Robetta.
- Introducción al *docking* molecular (AutoDock Vina). Teoría y preparación. Práctica de *docking* molecular con AutoDock Vina.

Clase 1: Introducción al Reposicionamiento de Fármacos. Búsqueda de compuestos en bases de datos (PubChem/ChEMBL/DrugBank) (2 horas)

Objetivos: Comprender qué es el reposicionamiento de fármacos y su importancia en el desarrollo de nuevos tratamientos. Conocer ejemplos exitosos de medicamentos reutilizados y las ventajas de esta estrategia (reducción de costo y tiempo de desarrollo). Entender la metodología general de un proyecto de reposicionamiento *in silico* (identificación de nueva diana terapéutica, búsqueda de compuestos existentes, evaluación computacional y validación experimental).

Parte 2:

Objetivos: Familiarizarse con bases de datos químicas públicas para identificar fármacos y compuestos candidatos. PubChem y ChEMBL, buscar información detallada de moléculas

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

Pharmaceutical and Biotechnological Innovation-Services SAS de CV

www.pharbiois.com



conocidas (estructura, propiedades fisicoquímicas, bioactividad, etc.). Localizar compuestos “listos para docking” y disponibles comercialmente para pruebas *in silico*. Entender qué tipo de información brinda cada base de datos y cómo usar sus filtros de búsqueda.

Clase 2: Recursos genómicos y análisis comparativo (Introducción a NCBI y UniProt). Introducción a Python para análisis bioinformático. (2 horas)

Objetivos: Conocer las bases de datos bioinformáticas NCBI (*National Center for Biotechnology Information*) y UniProt, relevantes para el reposicionamiento. Aprender a obtener secuencias de genes/proteínas (por ejemplo, la secuencia de una diana terapéutica humana o de un patógeno) desde la base de datos *NCBI Gene* o *Protein*. Entender cómo realizar análisis comparativos básicos, en particular usando la herramienta BLAST para alinear secuencias y encontrar proteínas homólogas en distintas especies. Esto ayuda a evaluar selectividad de un fármaco (¿existe la diana en humanos o en el patógeno?) y estudiar la conservación de la diana.

Parte 2:

Objetivos: Instalar o acceder a un entorno Python fácil (por ejemplo, usar Google Colab en el navegador, sin instalar nada). Aprender los fundamentos básicos: ejecutar celdas de código, sintaxis mínima (variables, print, bucles simples). Conocer algunas bibliotecas populares útiles en química/bioinformática (ej: Biopython, pandas, etc.) y cómo pueden ayudar a manejar datos de secuencias, estructuras o resultados.

Clase 3: Estructura de Targets. RCSB Protein Data Bank. Modelado de proteínas. Modelado por homología con SwissModel. Predicción *de novo* con Robetta. (2 horas)

Objetivos: Obtener estructuras cristalográficas del RCSB Protein Data Bank, análisis de calidad. Introducir el concepto de modelado por homología de proteínas como método para obtener una estructura 3D aproximada de una proteína diana cuando no hay estructura experimental disponible. Aprender a usar el servidor web SWISS-MODEL para construir un modelo 3D a partir de una secuencia de aminoácidos, aprovechando estructuras conocidas de proteínas similares (plantillas). Comprender los criterios básicos de calidad de un modelo (identidad con la plantilla, parámetros GMQE/QMEAN). Preparar modelos de proteínas diana para posteriores estudios de docking.

Parte 2:

Objetivos: Presentar métodos de modelado *de novo* o por *ab initio* cuando la homología es baja o no existen estructuras conocidas relacionadas. Introducir el servidor Robetta (Baker Lab, UW) como plataforma de predicción de estructuras terciarias que combina enfoques de *Rosetta* (fragmentos, minimización energética) y, en versiones recientes, algoritmos de

Pharmaceutical and Biotechnological Innovation-Services SAS de CV

www.pharbiois.com



deep learning (RoseTTAFold). Aprender a utilizar Robetta para generar un modelo de proteína sin plantillas cercanas y comprender las diferencias con el modelado por homología.

Clase 4: Introducción al docking molecular (AutoDock Vina). Teoría y preparación. Práctica de docking molecular con AutoDock Vina. (4 horas)

Objetivos: Comprender el concepto de docking molecular (acoplamiento proteína-ligando) y por qué es útil en reposicionamiento de fármacos. Conocer la herramienta AutoDock Vina, un programa de *docking* molecular de código abierto ampliamente adoptado en investigaciones como estándar para predicciones de unión ligando-receptor. Aprender los pasos previos necesarios para realizar un docking: preparación de la estructura de la proteína y del ligando, definición del sitio de unión (caja de búsqueda).

Parte 2: Práctica de docking molecular con AutoDock Vina

Objetivos: Ejecutar un experimento de *docking* completo utilizando AutoDock Vina con los archivos preparados. Reforzar la comprensión de la salida del *docking* (energías de afinidad, poses) e interpretar los resultados en el contexto de reposicionamiento (¿el compuesto se une fuertemente a la nueva diana?). Identificar posibles candidatos prometedores según el puntaje de docking, manteniendo cautela sobre las limitaciones.

Integración de herramientas y proyecto final

Objetivos: Consolidar todo lo aprendido integrando las herramientas en un flujo de trabajo completo de reposicionamiento *in silico*. Orientar sobre recursos para continuar aprendiendo tras el curso.

Proyecto integrador: Los estudiantes, desarrollan un mini-proyecto guiado: cada uno elige un caso sencillo de reposicionamiento. Buscar un target proteico en la literatura, NCBI o PubChem y obtiene secuencia/estructura; busca posibles ligandos (fármacos similares a X o compuestos de una librería en ZINC). Ejecutar docking molecular y presentar sus hallazgos. El objetivo es que ejerciten el diseño de un flujo coherente. Entrega la interpretación de resultados para un *feedback* final.

Al concluir este curso básico, los participantes habrán adquirido una visión general del reposicionamiento de fármacos asistido por computadora. Podrán buscar información de moléculas en bases de datos públicas, obtener o modelar estructuras proteicas, realizar acoplamientos moleculares simples y analizar datos obtenidos, todo ello utilizando herramientas gratuitas accesibles desde una computadora personal. Se enfatiza que el

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

Pharmaceutical and Biotechnological Innovation-Services SAS de CV

www.pharbiois.com



enfoque fue introductorio y práctico, brindando las bases para que, a partir de aquí, puedan profundizar en las áreas que más les interesen, ya sea el docking avanzado, la programación bioinformática, o el análisis experimental que complementa al *in silico*.

Evaluación final del curso

inversión: **\$ 799.00 MXN** (aprox 40.00 USD). Para inscribirse hacer pago a la 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. También puede pagar en: <https://www.pharbiois.com/inscribirmeqsarconai> por **PayPal**, MERCADO PAGO (TDD, TDC, OXXO, etc) o stripe. Descuentos 10 % estudiantes de licenciatura, haber tomado 2 o más cursos/diplomados en pharbiois. 5 % estudiantes de Posgrado y posdocs, profesores de tiempo parcial, haber tomado un curso en pharbios.com.

Comentarios de alumnos que ha tomado el curso