

Curso de Predicción de Estructura 3D de Proteínas

Acerca de este curso

Este curso de 25 horas te lleva de la secuencia a la estructura 3D de proteínas con un enfoque práctico y reproducible. Comienza con los fundamentos de bioquímica estructural y de las técnicas experimentales (rayos X, criomicroscopía electrónica y RMN) para entender los límites y alcances del modelado computacional. Luego aborda las principales estrategias de predicción: modelado por homología, homología remota/threading y métodos ab initio/ML, aplicando herramientas de uso extendido como MODELLER (desde nivel básico hasta avanzado), Swiss-Model, I-TASSER, Robetta/Rosetta y ColabFold (AlphaFold2). Aprenderás a buscar y evaluar plantillas con BLAST, HHpred y MMseqs2, a generar alineamientos de calidad (MAFFT/Clustal), y a validar y refinar tus modelos mediante Ramachandran, MolProbity, ProSA, ERRAT, VERIFY3D, QMEAN, además de métricas como TM-score y RMSD. El curso culmina con un proyecto integrador en el que cada participante construye, compara y deja “docking-ready” el modelo de una proteína real, incluyendo protonación, corrección de bucles, cofactores/iones y documentación técnica con figuras y tablas de calidad. Está dirigido a estudiantes y profesionales de biología, biotecnología, bioquímica, química y farmacéutica, así como a investigadores que buscan acelerar proyectos de diseño racional de fármacos. Requiere nociones básicas de biología molecular, acceso a internet y equipo de cómputo (MODELLER solicita clave académica gratuita). Al finalizar, serás capaz de seleccionar la estrategia adecuada según la identidad de secuencia y datos disponibles, construir múltiples modelos comparables, detectar y corregir errores locales y entregar un informe técnico listo para estudios posteriores como docking o dinámica molecular.

Perfil del aprendiz



Formación académica básica en Biología, Bioquímica, Biotecnología, Inmunología, Farmacia, Medicina, Ciencias de la Salud o campos relacionados. Conocimientos básicos de inmunología y biología molecular. Familiaridad con conceptos de nanotecnología y su aplicación en biomedicina. Manejo de herramientas de bioinformática y análisis de datos. Capacidad para trabajar con software de modelado molecular y simulaciones. Motivación por el desarrollo de nuevas estrategias de vacunación y soluciones innovadoras en salud.

Modalidad

Acceso inmediato a los contenidos del curso tras la inscripción, a través de la plataforma: <https://pharbiois.milaulas.com>.

Se ofrecen 25 horas de contenido grabado que se pueden seguir de manera asincrónica, junto con material seleccionado, como artículos científicos y vídeos de expertos(as) en la materia.

Este curso está diseñado para completarse en un plazo de **cinco semanas**, pero su modalidad asincrónica puede ser concluido en una semana, además, por el acceso ilimitado durante un año permiten a los participantes avanzar según su disponibilidad y revisar los temas cuando lo necesiten.

El acompañamiento personalizado de nuestros instructores estará disponible de forma continua a lo largo de la duración del curso.

Al completar al menos el 80% de las actividades del curso, recibirán una certificación tras evaluar la calidad en el curso y la atención brindada por Pharbiois a través de las plataformas de Survey Monkey en <https://www.surveymonkey.com/r/J2WYNVX> y Google Maps en <https://g.page/r/CRpW33pcN6YZEBM/review>, o por correo electrónico a la dirección ventas@pharbiois.com, con el asunto “Opinión Inmunoinformática PHC12”.



Validez

La certificación de este curso cuenta con respaldo oficial y curricular de la Secretaría de Educación Pública de México, a través de la red SEP-CONOCER, con el estándar de competencia EC0301 y EC0366.

Instructor

Dr. José Correa Basurto



Este curso es impartido en su totalidad por el [Dr. José Correa Basurto](#). El Dr. Correa es Médico, Maestro en Ciencias en Farmacología y Doctor en Investigación Médica por la Escuela Superior de Medicina del Instituto Politécnico Nacional, en México (ESM-IPN). Además, es Maestro en Bioinformática por la Universidad Internacional de Andalucía, en España.

Es Profesor e Investigador a tiempo completo en el Laboratorio de Diseño y Desarrollo de Nuevos Fármacos y Biotecnología de la ESM-IPN. Forma parte del Sistema Nacional de Investigadoras e Investigadores (SNII) en su nivel más alto, SNII-III, en México. Ha publicado 250+ artículos de investigación, 12 capítulos de libro y cuenta con 11+ patentes aprobadas en México y tiene 4+ libros en estas temáticas. Además, actúa como editor y revisor para diversas revistas internacionales de alto impacto en Química Medicinal y Modelado Molecular.

Temario

Unidad 1 · Introducción y preparación



Objetivos: alinear expectativas, revisar software y datos de ejemplo.

Contenidos

- Flujo general de trabajo: *secuencia* → *alineamientos* → *plantillas* → *modelado* → *refinamiento* → *validación* → *uso*.
 - Instalación / acceso: **PyMOL / UCSF ChimeraX, MODELLER, I-TASSER, ColabFold (AlphaFold2), Rosetta / Robetta, Swiss-Model, HHpred, BLAST / MMseqs2, MolProbity, ProSA-web, ERRAT, VERIFY3D, QMEAN, Ramachandran.**
 - Carpeta de proyecto y buenas prácticas (nombres, metadata, README, control de versiones ligero).
-

Unidad II · Fundamentos

Objetivos: comprender la base biológica y computacional de la predicción estructural.

Contenidos (teórico-práctico)

1. Generalidades de proteínas

- Niveles estructurales (1°–4°), dominios, motivos, PPI, cofactores, iones, PTMs.
- Técnicas experimentales: **RX, Cryo-EM, RMN** (fortalezas/limitaciones).

2. Clasificación de métodos de predicción

- **Modelado por homología** (comparativo) y **remoto** (threading).
- **Ab initio / free modeling.**
- Enfoques **ML/AlphaFold2** y metapredictores.



3. Búsqueda de plantillas y alineamientos

- **Uniprot, PDB, SIFTS**; búsqueda **BLAST, HHpred, MMseqs2**; MSA (**Clustal-Omega, MAFFT**).
- Métricas: cobertura, identidad/similitud, E-value, *probability/score* (HHsearch).

4. Predictores complementarios

- Estructura secundaria (**PSIPRED**), desorden (**IUPred**), transmembrana (**TMHMM/DeepTMHMM**), señales (**SignalP**), sublocalización.

Práctica: descargar secuencia objetivo, ejecutar BLAST/HHpred, construir MSA y hoja de criterios para elegir plantilla(s).

Unidad II · Taller de predicción

Objetivos: aplicar y comparar distintos métodos con datos reales.

Módulo A · Modelado por homología

- **Selección de plantilla(s)** y definición de regiones problema (gaps/bucles).
- **MODELLER – básico/intermedio/avanzado:**
 - Preparación de *alignment* (.ali), *topology* y *restraints*.
 - Generación de múltiples modelos, **DOPE/GA341** y elección del mejor.
 - **Refinamiento local:** reconstrucción de lazos, protonación, cofactores.



- **Swiss-Model:** pipeline automático y reporte **QMEAN**.

Práctica: crear 20–50 modelos con MODELLER, comparar con Swiss-Model y seleccionar *top-3*.

Módulo B · Modelado por homología remota / threading

- **I-TASSER:** conceptos de *threading*, ensamblaje de fragmentos, **C-score, TM-score**.
- Integración de restricciones (cofactores/disulfuro) cuando aplique.

Práctica: enviar trabajo a I-TASSER, interpretar C-score/TM-score, comparar con homología.

Módulo C · Ab initio / ML

- **AlphaFold2 / ColabFold:** MSA con **MMseqs2**, *templates on/off*, modelos y pLDDT/PAE.
- **Robetta–Rosetta:** *ab initio/comparativo, relax y side-chain packing*.
- **Ensamble y consenso:** cuándo promediar/seleccionar por región.

Práctica: correr **ColabFold** (rápido) y **Robetta** (en cola), generar informe comparativo.

Unidad III · Evaluación y refinamiento de modelos

Objetivos: validar calidad, corregir errores locales y dejar el modelo listo para uso downstream.

Contenidos (teórico-práctico)

1. Validación geométrica y estereoquímica (2 h)



- **Gráficas de Ramachandran** (favored/outliers).
- **MolProbity** (clashes, rotámeros), **VERIFY3D, ERRAT, ProSA-Z-score, QMEAN**.
- RMSD/ TM-score vs. plantilla (cuando hay estructura experim.).

2. Refinamiento/energía

- Preparación en **ChimeraX/PyMOL**; *minimize structure*, tapas de extremos, puentes disulfuro.
- **Rosetta relax / FastRelax** (conceptos); protonación a pH (PropKa/H⁺⁺).
- Inserción de cofactores/iones (Zn/Mg) y coordinación.

3. Listo para aplicaciones

- Definición de **estado oligomérico** (AlphaFold-Multimer, PISA).
- Limpieza para **docking** (coordenadas, protonación, *missing loops*), y para **dinámica molecular** (parámetros, topología).
- Documentación y empaquetado reproducible (scripts + *notebook*).

Práctica: validar los *top-3* modelos con Ramachandran/ERRAT/VERIFY3D/QMEAN, refinrar uno y dejarlo *docking-ready*.

Unidad IV · Proyecto integrador y cierre

Objetivos: integrar todo el flujo en un caso real y presentar resultados.

Actividades



- Cada equipo toma una proteína (enzima, GPCR, metaloproteína o diana clínica), ejecuta **dos rutas** (p. ej., MODELLER vs. ColabFold), valida, refina y entrega:
 - **Informe breve** (métodos, parámetros clave, figuras, tabla de métricas).
 - **Modelo final** + archivos de entrada/salida y checklist de calidad.
- Discusión de limitaciones, *pitfalls* y buenas prácticas.

Instrucciones de registro

1. Realiza tu inversión a través de las plataformas disponibles en:
<https://www.pharbiois.com/inscribirme-prediccion-estructura-proteinas>
2. Envía el comprobante de pago a ventas@pharbiois.com con el asunto “Inscripción predicción estructura PHC12” (si requieres factura, incluye tu Constancia de Situación Fiscal).
3. Recibirás por correo electrónico toda la información necesaria para acceder a las sesiones grabadas.

Descuentos disponibles

En Pharbiois, creemos firmemente en la importancia de contribuir a la educación de la juventud mexicana y latinoamericana. Por ello, ofrecemos descuentos especiales para los siguientes grupos:

- Estudiantes de Licenciatura o Pregrado, del 10%
- Estudiantes de Posgrado, del 5%
- Antiguos estudiantes de Pharbiois, del 5%
- Referidos por antiguos estudiantes de Pharbiois, del 5%

- Asistentes a la Masterclass Gratuitas y obtén tu descuento, del 10%

Si eres elegible para alguno de estos descuentos, envíanos un correo a ventas@pharbiois.com con el asunto “Descuento predicción estructura PHC12”.

Conoce todos nuestros productos y servicios

Congreso anual de Divulgación y Emprendimiento en Innovación CDEI

Organizado en colaboración con Pharbiois, este evento reúne a expertos en ciencia, tecnología e innovación para explorar y compartir avances en salud, biotecnología y emprendimiento científico. Con conferencias magistrales, talleres especializados y espacios de *networking*, el CDEI fomenta la colaboración interdisciplinaria, brindando una experiencia enriquecedora para profesionales y estudiantes. Más información:

<https://www.pharbiois.com/2docdei>.

Cursos y Diplomados en Farmacéutica Computacional

Conoce nuestros más de 30 Cursos y 7 Diplomados respaldados por la Secretaría de Educación Pública de México (SEP) a través de la red SEP-CONOCER. Más información: <https://www.pharbiois.com>.

Servicios de Apoyo a la Investigación

Entendemos que los recursos computacionales, el tiempo y el aprendizaje de nuevas técnicas pueden ser factores limitantes en la investigación. Por ello, ofrecemos servicios especializados para la comunidad científica, realizados por expertos y garantizados por Pharbiois.

- *Consultoría en investigación farmacéutica/biotecnológica in silico*
- *Ánálisis estadístico en salud y farmacéutica*
- *Corrección de estilo en inglés*
- *Redacción de patentes*
- *Asesoría a emprendedores*
- *Simulaciones in silico (docking, dinámica molecular, mecánica cuántica)*
- *Diseño de proyectos biomédicos in silico*

- *Edición de figuras científicas*
- *Reposicionamiento de fármacos*
- *Diseño de nuevos fármacos in silico*
- *Toxicoinformática (OECD, ICH)*
- *Análisis ómico (metabolómica, proteómica)*
- *Estudios preclínicos con Laboratorios LEI*

Más información: <https://www.pharbios.com/consultoria-y-servicios> o a los correos electrónico: ventas@pharbios.com, pharmaceuticalandbiotechnology@gmail.com y WhatsApp: 5522492524

Referencias

Webb, B. & Sali, A. "Comparative Protein Structure Modeling Using MODELLER." *Curr Protoc Bioinformatics* (actualización continua en Wiley). Guía práctica del pipeline de modelado por homología con MODELLER.

Waterhouse, A. et al. "SWISS-MODEL: homology modelling of protein structures and complexes." *Nucleic Acids Research* 46(W1):W296–W303 (2018). Revisión/plataforma para modelado por plantillas, de la búsqueda a la evaluación del modelo.

Yang, J. et al. "The I-TASSER Suite: protein structure and function prediction." *Nature Protocols* 12:7–71 (2017) – visión general y actualización del enfoque iterativo de I-TASSER (plantilla + refinamiento ab initio).

Kim, D. E., Chivian, D. & Baker, D. "Robetta server." *Nucleic Acids Research* 32:W526–W531 (2004). Servidor para modelado (fragmentos/ab initio, ensamblaje Rosetta) y análisis; base de los workflows modernos (incl. RoseTTAFold).

Jumper, J. et al. "Highly accurate protein structure prediction with AlphaFold." *Nature* 596:583–589 (2021). Descripción original de AlphaFold2, red neuronal que revolucionó

la predicción *de novo*.

Williams, C. J. et al. "MolProbity: More and better reference data for improved all-atom structure validation." *Protein Science* 27:293–315 (2018). Estándar de referencia para validación estructural (Ramachandran, clashes, rotámeros).

