

Pharmaceutical and Biotechnological
Innovation-Services SAS de CV



RENIECYT-SECIHTI: 2000001

Diplomado en Docking y Dinámica Molecular

Constancia con folio de validez oficial de la red CONOCER-SEP del EC0301 y EC0366



Profesor: Varios Profesores (ver por módulo)

Duración del diplomado: 150 horas, de marzo-agosto 2025 (6 meses)

100% online mediante plataformas [www.google classroom](https://www.google.com/classroom/) y/o
<https://pharbiois.milaulas.com/>

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

Pharmaceutical and Biotechnological Innovation-Services SAS de CV



El **Diplomado** está diseñado para brindar al alumno una formación teórico-práctica en bioinformática estructural. A lo largo del programa, el participante aprenderá los fundamentos de la estructura de proteínas desde 1D hasta 4D, el análisis de interacciones no covalentes entre ligandos y proteínas, y la aplicación de herramientas computacionales para realizar estudios de acoplamiento molecular (docking) y dinámica molecular en sistemas complejos, incluyendo entornos de membrana. Este diplomado es impartido por un profesor-investigador con experiencia y publicaciones científicas internacionales en el área. Se sugiere tener formación básica en biología molecular, química general o bioquímica, y conocimientos introductorios en bioinformática o manejo de archivos estructurales (como PDB). Este diplomado es ideal para estudiantes, investigadores y profesionales interesados en el diseño racional de fármacos, el análisis estructural de biomoléculas, la farmacología computacional y el desarrollo de proyectos de investigación académica o aplicada en biomedicina, biotecnología o la industria farmacéutica.

TEMARIO

Módulo 1

Curso de Visualización y Modelado de Proteínas

(Dr Lenin Domínguez Ramírez, SNII-2)

Presentación

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

Pharmaceutical and Biotechnological Innovation-Services SAS de CV



- I Las ventajas de usar UCSF Chimera para el análisis de estructuras obtenidas por difracción de rayos X
- II. UCSF Chimera (1.16)
 1. ¿Qué es UCSF Chimera?
 2. ¿Cómo funciona?
 3. ¿Con qué estructuras funciona?
- III. Ventanas básicas
 1. Ventana principal
 2. Ventana de modelos
 3. Ventana lateral
 4. Generalidades de otras ventanas
- IV. Uso del ratón
 1. Tipo de interacciones con el ratón
 2. Como modificar la interacción usando el ratón
 3. Limitaciones
- Visualización básica e interacción.
 1. Listones, hélices, láminas.
 2. Estructura secundaria por colores
 3. Átomos, esferas, esferas con escala y más
- VI. Visualizaciones predefinidas.
 1. Estructura secundaria
 2. Todos los átomos.
 3. Superficie hidrofóbica.
 4. Siluetas, color de fondo, niebla y más.
 5. Archivado de imagen.
 6. Archivado de representación.
- VII. Etiquetas y colores.
 1. Selecciones de átomos, residuo, y molécula.
 2. Etiquetar y configuración de la etiqueta.

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

Pharmaceutical and Biotechnological Innovation-Services SAS de CV



3. Colores de la selección.
 - VIII. Distancias, puentes de hidrógeno y contactos
 1. Selección de átomos o centroides.
 2. Selección de átomos, íter-molécula o intramolecular.
 3. Selección he interpretación.
 4. Archivado.
 - IX. Ángulos, rotameros y choques.
 1. Selección de átomos.
 2. Selección y modificación.
 3. Selección de átomos e interpretación.
 - X. Superficies y atributos.
 1. Cálculo de superficies
 2. Representación de superficies
 3. Mapeo de propiedades a la superficie.
 - XI. Superposición de estructuras y secuencias.
 1. Superposición de monomeros
 2. Superposición de multímeros
 3. Superposición de secuencias
 - XII. Análisis de estructuras, ligandos y heteroátomos.
 1. Aplicando los principios aprendidos.
 - XIII. Preparación y reparación de estructuras para docking.
 1. Remoción del solvente.
 2. Remoción de iones.
 3. Reemplazo de cadenas laterales.
 4. Adición de hidrógenos.
 5. Adición de cargas
 - XIV. Visualización de resultados de docking (autodock, vina o ADFR)
 1. Autodock Vina
 2. ViewDock

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

Pharmaceutical and Biotechnological Innovation-Services SAS de CV



- XV. Archivado de resultados.
 1. Salvado de sesiones.

Módulo 2

Curso de Docking Flexible Proteína-Ligando

(Dr Lenin Domínguez Ramírez, SNII-2)

- **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

Pharmaceutical and Biotechnological Innovation-Services SAS de CV



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)

Pharmaceutical and Biotechnological Innovation-Services SAS de CV



- 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.**

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

Pharmaceutical and Biotechnological Innovation-Services SAS de CV



- 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**

Módulo 3

Docking Proteína-proteína

(M en C Alberto Domínguez Guillen)

I.- Fundamentos de la Interacción Proteína-Proteína

- Introducción al docking proteína-proteína
- Niveles estructurales de las proteínas: primaria, secundaria, terciaria y cuaternaria
- Importancia del docking en la biología estructural y el diseño de fármacos

II.- Metodologías de Docking Proteína-Proteína

- Clasificación de las estrategias de docking
 - Docking ciego
 - Docking dirigido
 - Docking flexible
- Criterios para seleccionar el método adecuado en predicciones de docking

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

Pharmaceutical and Biotechnological Innovation-Services SAS de CV



III.- Técnicas y Herramientas para el Docking

Proteína-Proteína

- Principales enfoques computacionales
- Introducción a servidores de docking:
 - HDOCK
 - ClusPro
 - FRODOCK 2.0
 - SwarmDock
 - HADDOCK
 - PatchDock
 - SymmDock

IV.- Estudio de docking usando ClusPro

- Estudio de docking proteína-proteína usando ClusProt
- Selección de proteínas
- Entrar al servidor y hacer simulación

V.- Evaluación y Análisis de Resultados

- Evaluación y selección de modelos predichos
- Análisis de la interfaz de interacción entre cadenas proteicas
- Interpretación estructural y validación de predicciones

Módulo 4

Dinámica Molecular de Proteínas en Medio

Acuoso

Pharmaceutical and Biotechnological Innovation-Services SAS de CV



(Dr José Correa Basurto, SNII-3)

- Presentación.
- Estructura de proteínas.
- Aplicación de dinámica molecular (DM) en el área farmacéutica.
- Aplicación de DM en el área biotecnológica.
- Generalidades sobre Campos de Fuerza (force fields).
- Conceptos, (RMSD, RMSF, Rg, superficies accesibles a solvente, cambios conformacionales).
- Ejercicios de visualización con VMD.
- Archivos requeridos para una DM.
- Preparación de archivos para correr DM.
- Minimización de estructura para DM.
- Simulación de DM en NAMD.
- Continuación de simulación de DM en NAMD.
- Análisis de resultados por VMD.
- Análisis de resultados por CARMA.
- Continuación de análisis de resultados por CARMA.
- Actividad final: realizar ejercicio de dinámica molecular usando proteína de su interés

Módulo 5

DINÁMICA MOLECULAR PROTEÍNA-LIGANDO

(Dr Jorge Luis Rosas Trigueros, SNII-1)

Presentación del módulo y examen diagnóstico

Unidad I: Conceptos básicos sobre proteínas (3 horas)

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

Pharmaceutical and Biotechnological Innovation-Services SAS de CV



1. Proteínas

- Las proteínas
- Importancia de las proteínas como biomoléculas
- Propiedades y clasificación de los aminoácidos
- Niveles estructurales de las proteínas
- Relación estructura y función en las proteínas

Unidad II: Dinámicas Moleculares proteínas-ligando (6 horas)

1. Aplicación de la dinámica molecular para el estudio de biomoléculas
2. Conceptos sobre dinámicas moleculares
 - Definición de dinámica molecular
 - Descripción general de la metodología
 - Campo de fuerza y parámetros
 - Algoritmos
 - Condiciones periódicas
 - Controles de temperatura y presión
3. Introducción al programa NAMD (NAMD como paquete de dinámica molecular)
 - Generalidades sobre NAMD
 - Generación del sistema de simulación
 - Análisis de la estructura inicial
 - Neutralización de la carga del sistema
 - Solvatación del sistema de simulación
 - Establecimiento de la rutina de simulación
 - Descripción de las fases de un algoritmo de simulación
 - Generación de archivos de entrada (inputs) para la simulación
 - Hacer ejercicio para correr una dinámica corta

Pharmaceutical and Biotechnological Innovation-Services SAS de CV



4. Proteína-Ligando.

Unidad III: Análisis de las Dinámicas moleculares (6 horas)

1. Análisis de simulaciones con Carma
2. Introducción a Carma
 - Descripción de un archivo de entrada
 - Cálculo y análisis de Desviación cuadrática media(RMSD)
 - Cálculo y análisis de Radio de giro (RG)
 - Cálculo y análisis de Fluctuación cuadrática media (RMSF)
 - Agrupamiento de estructuras
 - Cálculo y análisis de componentes principales (PCA)
 - Cálculo de energía libre de los ligandos en Dinámica molecular
3. Análisis de datos de dinámica proteína-ligando con VMD

Módulo 6

DINÁMICA MOLECULAR PROTEÍNA-MEMBRANA

(Dr Jorge Luis Rosas Trigueros, SNII-1)

Presentación del módulo y examen diagnóstico

Unidad I: Conceptos básicos sobre proteínas y membranas (3 horas)

1. Biomoléculas
 1. Importancia de las membranas como biomoléculas
 2. Importancia de las proteínas como biomoléculas
 3. Propiedades y clasificación de los aminoácidos
 4. Niveles estructurales de las proteínas

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

Pharmaceutical and Biotechnological Innovation-Services SAS de CV



5. Relación estructura y función en las proteínas
2. Métodos de determinación estructural de proteínas
 1. Métodos de determinación estructural
 - Cristalografía de rayos X
 - Resonancia magnética nuclear
 - Cryo-electro microscopía.
 - Instalación de VMD, NAMD y CARMA (asincrónico)

Unidad II: Dinámicas Moleculares de proteínas transmembranales (6 horas)

1. Aplicación de la dinámica molecular para el estudio de biomoléculas
2. Conceptos sobre dinámicas moleculares
 - Definición de dinámica molecular
 - Descripción general de la metodología
 - Campo de fuerza y parámetros
 - Algoritmos
 - Condiciones periódicas
 - Controles de temperatura y presión

Unidad III: Introducción a los programas de dinámica molecular

1. NAMD
 2. Amber
 3. Gromacs
-
1. NAMD como paquete de dinámica molecular
 1. Generalidades sobre NAMD
 2. Generación del sistema de simulación
 - Análisis de la estructura inicial

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

Pharmaceutical and Biotechnological Innovation-Services SAS de CV



- Neutralización de la carga del sistema
- Solvatación del sistema de simulación
- Establecimiento de la rutina de simulación
- Descripción de las fases de un algoritmo de simulación
- Generación de archivos de entrada (inputs) para la simulación
- Correr simulación de DM con NAMD en sus computadoras
(continuar asincrónico)

Unidad IV: Análisis de las dinámicas moleculares (6 horas)

1. Análisis de simulaciones con Carma
2. Introducción a Carma
 - Descripción de un archivo de entrada
 - Cálculo y análisis de Desviación cuadrática media(RMSD)
 - Cálculo y análisis de Radio de giro (RG)
 - Cálculo y análisis de Fluctuación cuadrática media (RMSF)
 - Agrupamiento de estructuras
 - Cálculo y análisis de componentes principales (PCA)
 - Análisis de la estructura y dinámica de la membrana

INVERSIÓN: \$ **6,499.00** MXN, aproximadamente **360 USD**. **Nota:** 10 %: Estudiante de licenciatura, grupos > de 4 alumnos, haber tomado 2 cursos y/o diplomados en pharbiois. 5 %, estudiante de posgrado tienen, haber tomado un curso en www.pharbiois.com, grupos de 2-3 alumnos, profesores de tiempo parcial. Damos **factura y constancia del diplomado**. El pago también puede ser diferido por módulos, cada módulo 1,399.00 MXN, 63.00 USD. Para inscribirse en México o fuera de México puedes pagar por: <https://www.pharbiois.com/inscribirme-diplomado-dockinging-y-dm> (PayPal, Mercado Pago y stripe), en México se puede pagar por transferencia bancaria 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:

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

Pharmaceutical and Biotechnological Innovation-Services SAS de CV



pharmaceuticalandbiotechnology@gmail.com, informes, cotizaciones tambien por ventas@pharbiois.com

Comentarios al diplomado

- La enseñanza fue excelente y me sentí en confianza de cometer errores en el aprendizaje
- El diplomado estuvo muy bien estructurado; sin embargo, desde mi punto de vista se necesitan más sesiones para abarcar todo el contenido. La doctora incluso amablemente nos daba 1 hora extra. En verdad disfruté y sobre todo aprendí mucho.
- Me gustaría aumentar el tiempo de práctica y disminuir la teoría
- Me agrado el diplomado, como sugerencia considero que una clase más para este tema quedaría menos apresurada, pero en general muy buen diplomado
- Agradezco toda la paciencia y amabilidad, realmente realizó un excelente trabajo.
- Muy bueno el diplomado, una herramienta valiosa para introducirse a la bioinformática