

Pharmaceutical and Biotechnological
Innovation-Services SAS de CV



Registro RENIECYT-CONAHCYT: 2000001

Curso de visualización y modelado de proteínas (docking) con UCSF Chimera



Profesor: Dr LENIN DOMÍNGUEZ RAMÍREZ
<https://scholar.google.com/citations?user=54xqlCwAAAAJ&hl=es>

Inicia: 19 de agosto del 2024

100% online: asincrónico (material disponible en todo momento) y sincrónico de 6:00 a 7:00 PM de CDMX, México los días: lunes, miércoles y viernes), 4 semanas (24 horas).

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



SOBRE EL CURSO

En este curso aprenderás a visualizar proteínas en estructura primaria (secuencias) y en tercera dimensión para análisis de alineamiento múltiple, análisis de datos estructurales así como su aplicación en acoplamiento molecular (docking) usando herramientas computacionales gratuitas en los tres principales sistemas operativos. Todo esto mediante UCSFChimera.

Sistemas operativos: Linux, Mac, Windows

Programa

I. Presentación

A. Las ventajas de usar UCSF Chimera para el análisis de estructuras obtenidas por difracción de rayos X

II. UCSF Chimera (1.16)

A. ¿Qué es UCSF Chimera?

B. ¿Cómo funciona?

C. ¿Con qué estructuras funciona?

III. Ventanas básicas

A. Ventana principal

B. Ventana de modelos

C. Ventana lateral



D. Generalidades de otras ventanas

IV. Uso del ratón

A. Tipo de interacciones con el ratón

B. Como modificar la interacción usando el ratón

C. Limitaciones

V. Visualización básica e interacción.

A. Listones, hélices, láminas.

B. Estructura secundaria por colores

C. Átomos, esferas, esferas con escala y más

VI. Visualizaciones predefinidas.

A. Estructura secundaria

B. Todos los átomos.

C. Superficie hidrofóbica.

D. Siluetas, color de fondo, niebla y más.

E. Archivado de imagen.

F. Archivado de representación.

VII. Etiquetas y colores.

A. Selecciones de átomos, residuo, y molécula.

B. Etiquetar y configuración de la etiqueta.

C. Colores de la selección.



VIII. Distancias, puentes de hidrógeno y contactos

- A. Selección de átomos o centroides.
- B. Selección de átomos, inter-molécula o intramolecular.
- C. Selección de interpretación.
- D. Archivado.

IX. Ángulos, rotameros y choques.

- A. Selección de átomos.
- B. Selección y modificación.
- C. Selección de átomos e interpretación.

X. Superficies y atributos.

- A. Cálculo de superficies
- B. Representación de superficies
- C. Mapeo de propiedades a la superficie.

XI. Superposición de estructuras y secuencias.

- A. Superposición de monómeros
- B. Superposición de multímeros
- C. Superposición de secuencias

XII. Análisis de estructuras, ligandos y heteroátomos.

- A. Aplicando los principios aprendidos.

XIII. Preparación y reparación de estructuras para docking.

Pharmaceutical and Biotechnological Innovation-Services SAS de CV



- A. Remoción del solvente.
- B. Remoción de iones.
- C. Reemplazo de cadenas laterales.
- D. Adición de hidrógenos.
- E. Adición de cargas

XIV. Visualización de resultados de docking (autodock, vina o ADFR)

- A. Autodock Vina
- B. ViewDock

XV. Archivado de resultados.

- A. Salvado de sesiones.

Inversión: \$ **1,499.00 MXN (85.65 USD)**. Para inscribirse en México, hacer 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 fuera de México y en México** en la página: <https://bit.ly/3NKwwUH> (PayPal, 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