

# Diplomado en Docking y Dinámica Molecular



**Profesor:** Dra Gema Lizbeth Ramirez Salinas,  
SNII-1

<https://scholar.google.com/citations?user=YYPRn0cAAAAJ&hl=es>

**Duración del diplomado:** 150 horas de septiembre-2024-noviembre 2024

**Inicia:** 9 de septiembre del 2024, online mediante plataforma [www.Rcampus.com](http://www.Rcampus.com)

[www.pharbiois.com](http://www.pharbiois.com)  
**RENECYT-CONAHCYT: 2000001**  
En gestión registro por la STPS y CONOCER-SEP

## ACERCA DEL DIPLOMADO

En este diplomado el alumno aprenderá conceptos de estructura de proteínas de 1D-4D, el alumnos maneja conceptos de interacciones ligando-proteína no covalentes, aprenderá a realizar estudios de acoplamiento molecular así como estudios de dinámica molecular de proteínas con ligando, en un entorno de membrana, etc. Es un diplomado de bioinformática estructural teórico-práctico desarrollado de la mano de un profesor-investigador experto con publicaciones científicas Internacionales.

# TEMARIO

## Módulo 1

### VISUALIZADORES DE PROTEÍNAS EN 3D

1. Bienvenida e introducción a la bioinformática
2. Herramientas de apoyo para preparación de archivos y análisis de resultados
3. Introducción a los visualizadores 3D de proteínas:

<https://www.rcsb.org/docs/additional-resources/molecular-graphics-software>

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

4. Instalación de PyMol
5. Ejercicios de visualización en PyMol
6. Instalación de Chimera
7. Ejercicios de visualización en Chimera
8. Instalación de VMD
9. Ejercicios de visualización en VMD
10. Instalación de accelrys-discovery
11. Ejercicios de visualización en accelrys-discovery
12. Instalación de Swiss-PdbViewer
13. Ejercicios de visualización en Swiss-PdbViewer
14. Instalación de maestro
15. Ejercicios de visualización en maestro
16. Instalación de marvin
17. Ejercicios de visualización en marvin

## **Módulo 2**

### **DOCKING LIGANDO-PROTEÍNA**

1. Propiedades fisicoquímicas de ligandos

2. Propiedades ADMET de ligandos
3. Bases de datos de ligandos
4. Dibujo en 2D y 3D de ligandos em software gratuito
5. Interacciones no covalentes
6. Estructura primaria de proteínas
7. Estructura secundaria de proteínas
8. Estructura terciaria de proteínas
9. Bases de datos de proteínas
10. Instalación de autodock tools
11. Instalación de autogrid y autodock
12. Preparación de archivos
13. Simulación de docking
14. Análisis de resultados de docking
15. Generación de figuras en Pymol del complejo  
ligando-proteína

## **Módulo 3**

### **DOCKING PROTEÍNA-PROTEÍNA**

## **Introducción a Docking proteína-proteína estructura de proteínas (primaria, secundaria, terciaria)**

- 1) Introducción a Docking proteína-proteína.
- 2) Clasificación de metodologías de Docking proteína-proteína.
  - a) Docking ciego
  - b) Docking Dirigido
  - c) Docking Flexible
- 3) ¿Qué tipo de método utilizar en la predicción de Docking proteína-proteína?

## **Técnicas de predicción de Docking de proteínas-proteínas.**

- 1) Docking proteína-proteína empleando los servidores
  - a) HDOCK
  - b) ClusPro
  - c) FRODOCK 2.0
  - d) SwarmDock
  - e) HADDOCK
  - f) PatchDock

g) SymmDock

**Evaluación y análisis de los Docking proteína-proteína.**

- 1) Evaluación y selección de los modelos predichos.
- 2) Análisis de la interfase entre las cadenas proteicas.

## **Módulo 4**

### **DINÁMICA MOLECULAR PROTEÍNA-AGUA**

1. Descripción química de un aminoácido
2. Clasificación de aminoácidos
3. Descripción del enlace peptídico
4. Angulos planos
5. Angulos diedros
6. mapas de Ramachandran
7. Análisis de formato PDB
8. Coordenadas de aminoácidos
9. factor B de un cristal

10. Descripción de RMSD
11. Descripción de RMSF
12. Descripción de radio de giro
13. Instalación de NAMD
14. Preparación de archivo de proteína para dinámica molecular
15. Simulación de dinámica molecular
16. Análisis de resultados de dinámica molecular en VMD
17. Análisis de resultados de dinámica molecular en CARMA

## **Módulo 5**

### **DINÁMICA MOLECULAR PROTEÍNA-LIGANDO**

#### **Conceptos básicos sobre proteínas**

1. Proteínas
  - i. Las proteínas

- ii. Importancia de las proteínas como biomoléculas
- iii. Propiedades y clasificación de los aminoácidos
- iv. Niveles estructurales de las proteínas
- v. Relación estructura y función en las proteínas

### **Dinámicas Moleculares proteínas-ligando**

- 1. Aplicación de la dinámica molecular para el estudio de biomoléculas
- 2. Conceptos sobre dinámicas moleculares
  - a. Definición de dinámica molecular
  - b. Descripción general de la metodología
  - c. Campo de fuerza y parámetros
  - d. Algoritmos
  - e. Condiciones periódicas
  - f. Controles de temperatura y presión
- 3. Introducción al programa NAMD
- 4. NAMD como paquete de dinámica molecular
  - a. Generalidades sobre NAMD
  - b. Generación del sistema de simulación



- c. Análisis de la estructura inicial
  - d. Neutralización de la carga del sistema
  - e. Solvatación del sistema de simulación
  - f. Establecimiento de la rutina de simulación
  - g. Descripción de las fases de un algoritmo de simulación
  - h. Generación de archivos de entrada (inputs) para la simulación
  - i. Hacer ejercicio para correr una dinámica corta
5. Proteína-Ligando.

### **Análisis de las Dinámicas moleculares**

- 1. Análisis de simulaciones con Carma
- 2. Introducción a Carma
  - a. Descripción de un archivo de entrada
  - b. Cálculo y análisis de Desviación cuadrática media( RMSD)
  - c. Cálculo y análisis de Radio de giro( RG)

- d. Cálculo y análisis de Fluctuación cuadrática media (RMSF)
  - e. Agrupamiento de estructuras
  - f. Cálculo y análisis de componentes principales (PCA)
  - g. 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**

Conceptos básicos sobre proteínas y membranas

#### 1. Biomoléculas

- a. Importancia de las membranas como biomoléculas

- b. Importancia de las proteínas como biomoléculas
  - c. Propiedades y clasificación de los aminoácidos
  - d. Niveles estructurales de las proteínas
  - e. Relación estructura y función en las proteínas
2. Métodos de determinación estructural de proteínas
- a. Métodos de determinación estructural
    - i. Cristalografía de rayos X
    - ii. Resonancia magnética nuclear
    - iii. Cryo-electro microscopía.
    - iv. Instalación de VMD, NAMD y CARMA  
(asincrónico)

### Dinámicas Moleculares proteínas transmembranales

- 1. Aplicación de la dinámica molecular para el estudio de biomoléculas
- 2. Conceptos sobre dinámicas moleculares
  - a. Definición de dinámica molecular

- b. Descripción general de la metodología
- c. Campo de fuerza y parámetros
- d. Algoritmos
- e. Condiciones periódicas
- f. Controles de temperatura y presión

#### Introducción a los programas de dinámica molecular

- g. NAMD
- h. Amber
- i. Gromacs

### 3. NAMD como paquete de dinamica molecular

- a. Generalidades sobre NAMD
- b. Generación del sistema de simulación
  - i. Análisis de la estructura inicial
  - ii. Neutralización de la carga del sistema
  - iii. Solvatación del sistema de simulación
  - iv. Establecimiento de la rutina de simulación

- v. Descripción de las fases de un algoritmo de simulación
- vi. Generación y preparación de archivos de entrada (inputs) para la simulación.
- vii. Correr simulación de DM con NAMD en sus computadoras (continuar asincrónico)

#### 4. Análisis de las dinámicas moleculares

##### 1. Análisis de simulaciones con Carma

##### 2. Introducción a Carma

- a. Descripción de un archivo de entrada
- b. Cálculo y análisis de Desviación cuadrática media (RMSD)
- c. Cálculo y análisis de Radio de giro (RG)
- d. Cálculo y análisis de Fluctuación cuadrática media (RMSF)
- e. Agrupamiento (clusters) de estructuras
- f. Cálculo y análisis de componentes principales (PCA)

# Pharmaceutical and Biotechnological Innovation-Services SAS de CV



COSTOS: \$ **6,299.00** 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](http://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 1,259.00 MXN, 63.00 USD. Para inscribirse en México o fuera de México puedes pagar por: <https://bit.ly/3qL6rgp> (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: [pharmaceuticalandbiotechnology@gmail.com](mailto:pharmaceuticalandbiotechnology@gmail.com), informes, cotizaciones también por [ventas@pharbiois.com](mailto:ventas@pharbiois.com)