

Pharmaceutical and Biotechnological
Innovation-Services SAS de CV



Registro RENIECYTSECIHTI: 2000001

Curso de Docking Flexible

Proteína-Ligando

Constancia con folio de validez oficial de la red SEP-CONOCER EC 0301 y EC 0366



Profesor: Dr LENIN DOMÍNGUEZ RAMÍREZ, SNII-2
<https://mx.linkedin.com/in/lenin-dominguez-9b852838>

Master Class GRATIS: 12 de febrero del 2026
Fecha de Inicio del curso: 23 de febrero del 2026

100% online: asincrónico (material disponible en todo momento) y sincrónico de
5:00 a 6:00 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

Pharmaceutical and Biotechnological Innovation-Services SAS de CV



Sistemas operativos: Linux, Mac, Windows

Acerca del curso

Este curso está dirigido a quienes deseen profundizar en el acoplamiento molecular incorporando la flexibilidad del receptor con ADFR (AutoDock for Flexible Receptors), sucesor de AutoDock y AutoDock Vina. Aprenderás a preparar archivos, ejecutar simulaciones y analizar resultados usando UCSF Chimera y Avogadro. Se requiere haber tomado el *Curso de Docking Proteína-Ligando con AutoDock*, además de tener conocimientos en biología molecular, formatos PDB o FASTA y nociones básicas de bioinformática. Lo aprendido se aplica en el diseño y reposicionamiento de fármacos, investigación biomédica y proyectos farmacéuticos o industriales.

TEMARIO

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

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

Pharmaceutical and Biotechnological Innovation-Services SAS de CV



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

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

Pharmaceutical and Biotechnological Innovation-Services SAS de CV



B. prepare_ligand

VIII.AGFRGUI

A. Receptor

B. Caja (acoplamiento ciego)

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

Pharmaceutical and Biotechnological Innovation-Services SAS de CV



XII. Estadística y convergencia

A. Análisis y visualización de los resultados

XIII. Acoplamiento de proteína con cadenas laterales flexibles.

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

Nota: Se califica con actividades en rcampùs.com (70%) y ejercicio final (30%), la constancia se entrega con calificación numérica de 1-10.

Inversión: \$ **1,499.00 MXN** (aprox **85 USD**). Para inscribirse, enviar Comprobante de 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 por PayPal: pharmaceuticalandbiotechnology@gmail.com y en la página <https://www.pharbiois.com/inscribirme-docking-flexible> por 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

Comentarios al curso

Excelentes cursos 100% recomendados.