

Curso de Modelado Molecular y Bioinformática Estructural de Proteínas

Acerca de este curso

El Curso de Modelado Molecular y Bioinformática Estructural de Proteínas es un programa educativo que se centra en las técnicas y herramientas utilizadas para estudiar la estructura y función de las proteínas mediante modelado molecular y enfoques bioinformáticos. Este curso es ideal para quienes desean profundizar en el análisis estructural de biomoléculas y su aplicación en la investigación biológica y farmacéutica. Los objetivos del curso son: Proporcionar una comprensión sólida de los principios del modelado molecular y la bioinformática estructural. Capacitar a los participantes en el uso de herramientas y técnicas para el análisis y predicción de estructuras proteicas. Fomentar la aplicación de estos conocimientos en la investigación y desarrollo de nuevas terapias y biotecnologías. Este curso es fundamental para quienes buscan integrar la biología molecular con enfoques computacionales en su trabajo. Dentro de los temas que se abordan se lograra: Comprender los principios básicos del modelado molecular y su relevancia en la biología estructural. Estudiar los diferentes niveles de organización de las proteínas y cómo su estructura se relaciona con su función biológica. Familiarizarte con software y bases de datos relevantes para el análisis de estructuras proteicas, como el PDB y Swiss-Model. Aprender técnicas de modelado por homología, modelado de ab initio y docking molecular, incluyendo la optimización y validación de modelos. Introducción a las simulaciones de dinámica molecular para explorar el comportamiento de las proteínas en diferentes condiciones. Aplicar métodos para predecir la estructura de proteínas a partir de su secuencia, utilizando herramientas computacionales.

Comprender cómo el modelado molecular se utiliza en el diseño de fármacos y la identificación de sitios de unión en proteínas. Analizar aplicaciones prácticas del modelado molecular en investigaciones biomédicas y biotecnológicas. Al finalizar el curso, tendrás una sólida comprensión de cómo utilizar técnicas de modelado molecular y bioinformática para estudiar y manipular estructuras proteicas, lo que te permitirá aplicar estos conocimientos en investigaciones y desarrollos en diversas áreas científicas.

Perfil del aprendiz

Para tomar un curso de Modelado Molecular y Bioinformática Estructural de Proteínas, se recomienda que el perfil del estudiante incluya lo siguiente: Tener una base sólida en biología molecular, bioquímica o ciencias relacionadas. Un grado en biotecnología, biología, química o campos afines es ideal. Familiaridad con conceptos de estructuras de proteínas, dinámicas moleculares y técnicas de modelado computacional. Experiencia previa con bases de datos biológicas y software de visualización de estructuras también es beneficiosa. Habilidad para analizar e interpretar datos experimentales y computacionales, así como resolver problemas complejos. Motivación por la investigación en biología estructural y aplicaciones en campos como la farmacología o el diseño de fármacos. Este perfil ayudará al estudiante a aprovechar al máximo el curso y a desarrollar habilidades valiosas en el campo de la modelación molecular y la bioinformática.

Modalidad

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

Se ofrecen **30 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 y 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 Modelado Molecular PHC01”.

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.

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 236 artículos de investigación, 12 capítulos de libro y cuenta con 7 patentes aprobadas en México. Además, actúa como editor y revisor para diversas revistas internacionales de alto impacto en Química Medicinal y Modelado Molecular.

Temario

1. Presentación del curso (examen diagnóstico)

- 1.1.- EXamen diagnóstico
- 1.2.- Contrato de aprendizaje
- 1.3.- Presentación breve del curso y bienvenida

2. Grupos Funcionales, Cargas atómicas, conformación y configuración, LogP, Efectos electrónicos y estéricos

- 2.1.- Grupos funcionales
- 2.2.- Cargas parciales
- 2.3.- Cargas totales
- 2.4.- Conformacional
- 2.4.- Configuración R, S
- 2.5.- Efectos estéricos

3. Descriptores químicos y QSAR

- 3.1.- Descriptores 0D-4D
- 3.2.- Estudios de relación estructura actividad

4. Descripción de aminoácidos y Estructura de proteínas

- 4.1.- Clasificación de aminoácidos
- 4.2.- Estructura 1-4 de proteínas

5. Conceptos de inmuno-informática

- 5.1.- Epitopes inmunogénicos



- 5.2.- Predictores de lineales
- 5.3.- Predictores de discontinuos
- 5.4.- MHC-I
- 5.5.- MHC-II
- 6. Diseño de fármacos considerando propiedades ADMET, virtual screening, PCAs y Drug screening workflow systems**
 - 6.1.- Qué son las propiedades ADMET
 - 6.2.- Predicción de propiedades ADMET
 - 6.3.- Qué son los análisis de componentes principales
 - 6.4.- Que es tamizaje de drogas a gran escala
- 7. Mecánica molecular (generalidades)**
 - 7.1.- Como se simplifican los átomos y grupos funcionales
 - 7.2.- Qué son los campos de fuerza
 - 7.3.- Qué son las interacciones covalentes
 - 7.3.- Qué son las interacciones no-covalentes
- 8. Métodos semi-empíricos y Mecánica cuántica**
 - 8.1.- Explicación de métodos semiempíricos
 - 8.2.- Explicación de mecánica cuántica
 - 8.3.-Aplicación de los métodos semiempíricos y de mecánica cuántica
 - 8.4.- Obtención de descriptores de mecánica cuántica
- 9. Conceptos de folding (plegamiento de proteínas)**
 - 9.1.- Búsqueda de secuencia de proteína consenso
 - 9.2.- BLAST para ver si hay estructura 3D
 - 9.3.- Si hay estructura parcial se puede agregar faltantes
 - 9.4.- Construcción de estructuras 3D por homología
 - 9.5.- Construcción de estructuras 3D por ab initio
 - 9.6.- Construcción de estructuras 3D por tensado
- 10. Docking ligando-proteína**
 - 10.1.- Qué es docking
 - 10.2.- Aplicación del docking
- 11. Docking macromolecular-macromolécula (proteína-proteína)**
 - 11.1.- Explicación del docking proteína-proteína

11.2.- Aplicación de los estudios de docking proteína-proteína

12. Dendrímeros como nano-acarreadores

12.1.- Qué son los dendrímeros

12.2.- Que es un dendron

12.3.- Uso de los dendrímeros

13. Principios básicos de Dinámica molecular

13.1.- Qué es la dinámica molecular

13.2.- Campos de fuerza

13.3.- Usos de la dinámica molecular

14. Taller docking (acoplamiento Molecular) (actividad Final)

14.1.- Obtención de ligando

14.2.- Preparación de ligandos y proteína

14.3.- Simulación de docking

14.4.- Análisis de resultados

15. Taller de dinámica molecular con VMD-NAMD (actividad final))

15.1.- Archivos requeridos para dinámica molecular

15.2.- Preparación de archivos

15.3.- simulación de dinámica molecular

15.4.- Análisis de resultados

Instrucciones de registro

1. Realiza tu inversión a través de las plataformas disponibles en: <https://www.pharbiois.com/inscribirme-modelado-proteinas>
2. Envía el comprobante de pago a ventas@pharbiois.com con el asunto "Inscripción Modelado Molecular PHC01" (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 Gratuita de Dinámica Molecular de Proteínas en Medio acuoso, del 20%

Si eres elegible para alguno de estos descuentos, envíanos un correo a ventas@pharbiois.com con el asunto “Descuento Modelado Molecular PHC01”.

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 25 Cursos y 6 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.

- Análisis bioestadísticos
- Simulaciones de acoplamiento (*docking*) y dinámica molecular
- Alquiler de tiempo y capacidad de cómputo
- Redacción de patentes
- Diseño y desarrollo de proyectos de investigación
- Edición de figuras creativas y técnicas
- Traducción y corrección de textos al inglés
- Asesoría para emprendedores

Más información: <https://www.pharbiois.com/consultoria-y-servicios> o al correo electrónico: ventas@pharbiois.com.

Referencias

Yao L. In silico search for drug targets of natural compounds. *Curr Pharm Biotechnol.* 2012 Jul;13(9):1632-9. doi: 10.2174/138920112800958940.

Vrontaki E, Melagraki G, Afantitis A, Mavromoustakos T, Kollias G. Searching for Novel Janus Kinase-2 Inhibitors Using a Combination of Pharmacophore Modeling, 3D-QSAR Studies and Virtual Screening. *Mini Rev Med Chem.* 2017;17(3):268-294. doi: 10.2174/1389557516666160919163930.

Correa-Basurto J. Molecular modeling and QSAR studies for drug design. *Curr Pharm Des.* 2013;19(12):2137. doi: 10.2174/1381612811319120001.

Rosales-Hernandez MC, Bermúdez-Lugo J, Garcia J, Trujillo-Ferrara J, Correa-Basurto J. Molecular modeling applied to anti-cancer drug development. *Anticancer Agents Med Chem.* 2009 Feb;9(2):230-8. doi: 10.2174/187152009787313819.

Bello M, Frago-Vázquez J, Correa-Basurto J. Theoretical Studies for Dendrimer-Based Drug Delivery. *Curr Pharm Des.* 2017;23(21):3048-3061. doi: 10.2174/1381612823666170228142429.

