

Pharmaceutical and Biotechnological  
Innovation-Services SAS de CV

www.pharbiois.com



RENIECYT-CONAHCYT: 2000001

# Diplomado en Docking y Dinámica Molecular

Constancia con validez oficial/curricular de la red CONOCER-SEP



**Profesor:** Varios Profesores (ver módulo)

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

**Inicia:** 30 de julio del 2025

100% online mediante plataformas [www.google clasroom](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](mailto:pharmacologicalandbiotechnology@gmail.com)

# Pharmaceutical and Biotechnological Innovation-Services SAS de CV

www.pharbiois.com



## 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

### Curso de Visualización y Modelado de Proteínas

(Dr Lenin Domínguez Ramírez, SNI-2)

#### Presentación

- 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?

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

# Pharmaceutical and Biotechnological Innovation-Services SAS de CV

www.pharbiois.com



- 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.
  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.

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

# Pharmaceutical and Biotechnological Innovation-Services SAS de CV



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

## Módulo 2

### Docking Proteína-Ligando con Autodock

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

# Pharmaceutical and Biotechnological Innovation-Services SAS de CV

www.pharbiois.com



**(Dr José Correa Basurto, SNI-3)**

- Presentación (examen diagnóstico)
- Grupos-funcionales-conformación-configuración
- Propiedades fisicoquímicas
- Propiedades ADMET
- Interacciones-no-covalentes
- Scoring-Sampling-Function (exploración y cálculo de energía)
- Preparación-Ligandos-docking
- Obtención-blanco-para-docking
- Instalación-Autodock-ADT-preparación-archivos
- Continuación-preparación-archivos para docking
- Análisis de resultados de docking
- Continuación-análisis-docking-validación
- Validación-docking
- Validación-docking-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**

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

# Pharmaceutical and Biotechnological Innovation-Services SAS de CV

www.pharbiois.com



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

## 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

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

# Pharmaceutical and Biotechnological Innovation-Services SAS de CV

www.pharbiois.com



## **Dinámica Molecular de Proteínas en Medio**

### **Acuoso**

**(Dr José Correa Basurto, SNI-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**

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

# Pharmaceutical and Biotechnological Innovation-Services SAS de CV

www.pharbiois.com



**(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
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



# Pharmaceutical and Biotechnological Innovation-Services SAS de CV



## 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
    - 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

# Pharmaceutical and Biotechnological Innovation-Services SAS de CV



## 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 ( 3 horas)

### 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

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

# Pharmaceutical and Biotechnological Innovation-Services SAS de CV



- 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
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

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](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 1,399.00 MXN, 63.00 USD. Para inscribirse en México o fuera de México puedes pagar por:

Fresno Norte No 14. San Miguel Tehuisco, Alcaldia Tlalpan C.P.14500  
[pharmacologicalandbiotechnology@gmail.com](mailto:pharmacologicalandbiotechnology@gmail.com)

# Pharmaceutical and Biotechnological Innovation-Services SAS de CV

[www.pharbiois.com](http://www.pharbiois.com)



<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 tambien por [ventas@pharbiois.com](mailto:ventas@pharbiois.com)

Fresno Norte No 14. San Miguel Tehuisco, Alcaldia Tlalpan C.P.14500  
[pharmacologicalandbiotechnology@gmail.com](mailto:pharmacologicalandbiotechnology@gmail.com)