

Diplomado en Bioinformática, inmunoinformática y Modelado Molecular

Acerca de este diplomado

El Diplomado en Bioinformática, Inmunoinformática y Modelado Molecular es un programa educativo diseñado para proporcionar a los estudiantes una comprensión profunda de las herramientas y técnicas computacionales aplicadas al análisis de datos biológicos y al estudio de sistemas inmunológicos y estructuras moleculares. A continuación, se describen los componentes clave del diplomado. Capacitar a estudiantes y profesionales en el uso de la bioinformática y el modelado molecular para resolver problemas en biología y medicina. Fomentar un enfoque multidisciplinario que combine biología, informática, química y biomedicina. Proporcionar experiencia práctica en el uso de software y herramientas relevantes en el campo. Este diplomado representa una excelente oportunidad para aquellos interesados en el cruce entre biología y tecnología, equipándolos con habilidades relevantes para el futuro de la investigación y la biomedicina.

Perfil del aprendiz

El perfil ideal para el Diplomado en Bioinformática, Inmunoinformática y Modelado Molecular incluye una combinación de formación académica, habilidades específicas y características personales que permitirán a los estudiantes aprovechar al máximo el programa. A continuación se detallan los aspectos clave de este perfil: Preferiblemente en biología, bioquímica, biotecnología, química, informática, farmacología o áreas relacionadas. Estudiantes de posgrado en campos afines también son bienvenidos. Se requieren conocimientos previos sobre estructuras biológicas, funciones de proteínas y procesos biológicos básicos. Familiaridad con conceptos de química orgánica y

bioquímica. Este perfil ayudará a los participantes a aprovechar al máximo las oportunidades de aprendizaje y desarrollo que ofrece el diplomado, preparándolos para contribuir de manera efectiva en el campo de la bioinformática, inmunoinformática y modelado molecular.

Modalidad

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

Se ofrecen 150 horas de contenido grabado que se pueden seguir de manera asincrónica, junto con material seleccionado, como artículos científicos y videos de expertos(as) en la materia. Este curso está diseñado para completarse en un plazo de cinco meses, pero su modalidad asincrónica, sin embargo, si le dedica más de 8 horas por día, en 1 mes lo termina. El acceso ilimitado durante un año permite 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 Bioinformática PHC02”.

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

Módulo 1

Bioinformática General

1. Presentación del curso (examen diagnóstico)

1.1.- Se aplica examen diagnóstico

- 1.2.- Se solicita firmar contrato de aprendizaje
- 1.3.- Breve presentación del curso
- 2. Arquitectura de Computadores**
 - 2.1.- Se explican los componentes básicos
 - 2.2.- Se explican los periféricos
 - 2.3.- Se explican la tarjeta madre, RAM, discos duros, etc
- 3. Sistemas Operativos (SO)**
 - 3.1.- Se platica de los SO más usados
 - 3.2.- Se explica linux
 - 3.3.- Se explica la función de los SO
- 4. Generalidades Linux**
 - 4.1.- Se explican las diferentes versiones
 - 4.2.- Se muestran y explican las modalidades de instalación
 - 4.3.- Se hacen ejercicios con los comandos más básicos
- 5. Introducción a las Redes**
 - 5.1.- Qué es una red
 - 5.2.- Historia del Internet
 - 5.3.- Explicación básicos (hardware y software) de los componentes del Internet
- 6. Programación Perl para Bioinformática**
 - 6.1.- Que es Perl
 - 6.2.- Donde se encuentra enLinux
 - 6.3.- Cómo instalarlo Perl
 - 6.4.- Hacer Ejercicios básicos con Perl
- 7. Conceptos generales de biología de ácidos nucleicos y proteínas**
 - 7.1.- Explicación de ácidos nucleicos en secuencia
 - 7.2.- Explicación de ácidos nucleicos a nivel químico
 - 7.3.- Explicación de estructuras 1-4 de proteínas
- 8. OMICS: Proteómica, metabolómica, lipidómica**
 - 8.1.- Qué es la cromatografía
 - 8.2.- Qué son las fuentes de ionización
 - 8.3.- Qué son los iones positivos y negativos
 - 8.4.- Qué es la metabolómica
 - 8.5.- Qué es la proteómica
- 9. Sistemática y Evolución (árboles filogenéticos)**
 - 9.1.- Qué es la sistemática
 - 9.2.- Diferentes clasificaciones para ver evolución
 - 9.3.- Qué es la sistemática molecular

- 9.4.- Qué son los árboles filogenéticos
- 9.5.- Ejercicio para realizar árboles filogenéticos
- 10. Quimioinformática (pequeñas-moléculas)**
 - 10.1.- Que es la quimioinformática
 - 10.2.- Organización de datos desde 0-4 D para análisis
 - 10.3.- Bases de datos para obtención de moléculas pequeñas
- 11. Bases de datos moleculares (macro-moléculas)**
 - 11.1.- Qué son las macromoléculas
 - 11.2.- Exploración de bases de datos de macromoléculas
- 12. Comparación de Secuencias biológicas-1**
 - 12.1.- Concepto de secuencias
 - 12.2.- Alineamiento pareado de secuencias
- 13. Comparación de Secuencias biológicas-2**
 - 13.1.- Plataformas para hacer alineamiento de secuencias
- 14. Comparación de Secuencias biológicas y alineamiento múltiple**
 - 14.1.- Explicación del alineamiento múltiple de secuencias
 - 14.2.- Exploración de las plataformas con ejemplos de secuencias de NCBI
- 15. Identificación de Genes**
 - 15.1.- Definir exon e intron
 - 15.2.- Qué es un gen
 - 15.3.- Predictores de genes
- 16. Análisis de Variación Poblacional (SNPs)**
 - 16.1.- Que es el SNPs
 - 16.2.- Aplicación biomédica de los SNPs
- 17. Fundamentos de Biotecnología (microarreglos)**
 - 17.1.- Que son los microarreglos
 - 17.2.- Tipos de microarreglos
 - 17.3.- material de soporte
- 18. Estadística bioinformática**
 - 18.1.- Definir la bioinformática
 - 18.2.- Describir los tipo de análisis estadísticas
 - 18.3.- Ejercicios de bioestadística
- 19. Ejercicio final (alineamiento múltiple, árboles filogenéticos etc con proteína de su interés).**

Módulo 2

Modelado Molecular

- 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

Módulo 3

Inmunoinformática

- 1. Presentación del curso (examen diagnóstico)**
 - 1.1.- Introducción a la inmunoinformática
- 2. Inmunidad innata y adaptativa**
 - 2.1.- Explicación general de la inmunidad innata
 - 2.2.- Explicación general de la inmunidad adaptativa
- 3. Reconocimiento de péptidos por MHC**
 - 3.1.- explicación de péptidos para MHC-I

3.2.- 3.1.- explicación de péptidos para MHC-II

3.3.- Interacciones no covalentes

4. MHC-Péptidos-TCR

4.1.- Reconocimiento MHC-péptido en medio acuoso

4.2.- Reconocimiento MHC-péptido en medio membranal con TCR

4.3.- Ventajas de las metodologías medio acuosos y con membrana

5. Estudios de QSAR en MHC

5.1.- Descriptores químico-estructurales

5.2.- Ejemplos de artículos de QSAR en MHC

5.3.- Ventajas de los estudios QSAR en MHC

6. Criterios para selección de proteína antigénica

6.1.- Explicación de proteínas expuesta en células

6.2.- Explicación de regiones expuestas en la proteína

6.3.- Proponer superficies aptas para ser alcanzadas por anticuerpos

7. Búsqueda de secuencias y alineamiento múltiple para obtención de secuencia consenso

7.1.- Explicación de NCBI

7.2.- Búsqueda de secuencias con palabras clave

7.3.- Descargar secuencias

7.4.- Realizar alineamiento múltiple

7.5.- Obtención de secuencia consenso

8. Estructura terciaria, construcción y obtención de PDB

8.1.- Formas de obtener las estructuras 3D de proteínas

8.2.- Búsqueda de base de datos de proteínas PDB

8.3.- explicación breve del plegamiento de proteínas

9. Evaluación de una estructura terciaria y minimización

9.1.- Parámetros a evaluar en estructura 3D de proteínas

9.2.- Ejercicios de evaluación de calidad estructural en servidores

10. Predicción de epítopes lineales e inmunoproteosoma

10.1.- Conceptos de péptidos inmunogénicos

10.2.- Que son los epítopes secuenciales o continuos

10.3.- Que es el inmunoproteosoma

11. Predicción de epítopos conformacionales

11.1.- Que es un epítoto conformacional o discontinuo

11.2.- POr que es importante tener la estructura de la proteína blanco en 3D

12. Obtención de epítopos usando complejos proteína-anticuerpo

12.1.- Cómo obtener estructuras proteína-anticuerpo

12.2.- Que es paratope

13.3.- Obtención de epítopos usando las superficies de contacto anticuerpo-proteína

13. Construcción e tercera dimensión y refinamiento estructural de epítopos

13.1.- Obtención de secuencia primaria

13.2.- Obtención de estructura 3D

13.3.- Validación de estructura 3D del epitope

14. Estudios de acoplamiento sobre MHC-I y MHCII

14.1.- Donde se encuentra el MHC-I y que péptidos acepta

14.2.- Donde se encuentra el MHC-II y que péptidos acepta

14.3.- estudios de docking peptide-MHC con clusprot

15. Dendrímeros como nanoacarreadores de péptidos

15.1.- Qué es un dendrímero

15.2.- Ventajas de dendrímeros para encapsular moléculas

16. Estudio de acoplamiento péptido-dendrímero (actividad final)

16.1.- Explicación de los complejos péptido-dendrímeros para nanovacunas

16.2.-Ejercicio de docking dendrímero-péptido con autodock vina

Módulo 4

Acoplamiento molecular (docking)

1. Presentación (examen diagnóstico)

1.1 Descripción del curso

2. Grupos funcionales, conformación y configuración

- 2.1.- Descripción de grupos funcionales polares y apolares
- 2.2.- Descripción de enlaces rotables y no rotables
- 2.3.- Descripción de confórmeros
- 2.4.- Descripción de centros quirales y configuración
- 3. Propiedades físicoquímicas**
 - 3.1 Descripción de coeficiente de partición (LogP)
 - 3.2 Descripción de formación de puentes de hidrógeno
 - 3.3 Descripción de peso molecular
- 4. Propiedades ADMET**
 - 4.1 Descripción de propiedades de absorción
 - 4.2 Descripción de propiedades de distribución
 - 4.3 Descripción de propiedades de metabolismo
 - 4.4 Descripción de propiedades de excreción
 - Descripción de propiedades de toxicidad
- 5. Interacciones-no-covalentes**
 - 5.1.- Descripción de puentes de hidrógeno
 - 5.2.- Descripción de interacciones electrostáticas
 - 5.3.- Descripción de interacciones apolares
 - 5.4.- Descripción de puentes de hidrógeno
 - 5.5 Descripción de puentes de interacciones aromáticas
- 6. Scoring-Sampling-Function (exploración y cálculo de energía)**
 - 6.1.- Descripción de campos de fuerza
 - 6.2.- Descripción de alculos de energía
 - 6.3.- Descripción de exploración ligando proteína
- 7. Preparación-Ligandos-docking**
 - 7.1.- Obtención de ligandos
 - 7.- Dibujado en 2D, 3D y minimización de ligandos
- 8. Obtención-blanco-para-docking**
 - 8.1.- Búsquedas en bases de datos (secuencias y estructuras 3D)
 - 8.2.- Obtención de las proteínas en 3D
- 9. Instalación-Autodock-ADT-preparación-archivos**
 - 9.1 Búsqueda del programa autodock tool en internet
 - 9.2.- Manejo del programa autodock tools
 - 9.3.- Preparación de ligando para generar archivos .pdbqt
- 10. Continuación-preparación-archivos para docking**
 - 10.1 Preparación de proteína en formato .pdbqt
 - 10.2.- ASignación de H polares
 - 10.3 ASignación de cargas parciales



11. Análisis de resultados de docking

- 11.1.- Obtención e instalación del programa autodock
- 11.2.- Simulación de docking con programa autodock
- 11.3.- Obtención de archivo .dlg
- 11.4.- Obtención de Ki (delta G)

12. Continuación-análisis-docking-validación

- 12.1.- Obtención de coordenadas de modo de unión
- 12.2.- Descripción de interacciones no covalentes

13. Validación-docking

- 13.1.- Validación considerando sitios reportados de literatura
- 13.- Validación considerando coordenadas de ligandos co-cristalizados (re-docking)

14. Validación-docking-final

- 14.- Obtención de RMSD de re-docking

15. ACTIVIDAD FINAL

- 15.1.- Seleccionar ligando de su interés
- 15.2.- Seleccionar proteína de su interés
- 15.3.- Preparar archivos
- 15.3.- Correr simulación de acoplamiento molecular
- 15.4.- Realizar análisis de resultados

Módulo 5

Dinámica molecular en proteína

1. Presentación y examen diagnóstico

- 1.1. Definición de dinámica molecular (DM)
- 1.2. Aplicaciones de la DM

2. Estructura de proteínas

- 2.1. Conceptos de aminoácidos
- 2.2. Estructura primaria de proteínas
- 2.3. Estructura secundaria de proteínas
- 2.4. Estructura terciaria de proteínas

3. Aplicación de dinámica molecular (DM) en el área farmacéutica.

3.1. Definición de receptor

3.2. Definición de ligando

3.3. Interacción ligando-receptor

4. Aplicación de DM en el área biotecnológica

4.1. Nanonacarreadores (dendrímeros)

4.2. Interacción dendrímeros-péptidos

5. Generalidades sobre Campos de Fuerza

5.1. Interacciones no covalentes

5.2. Interacciones covalentes

6. Conceptos (RMSD, RMSF, Rg, superficies accesibles a solvente, cambios conformacionales)

6.1. Definición de desviación de la raíz cuadrada media (RMSD)

6.2. Definición de la raíz media cuadrática de fluctuación (RMSF)

6.3. Definición de radio de giro (Rg)

7. Ejercicios de visualización con VMD

7.1. Instalación del programa Visual Molecular Dynamics (VMD):
<https://www.ks.uiuc.edu/Research/vmd/>

7.2. Introducción al uso de VMD por medio de ejercicios prácticos de visualización

(<https://www.ks.uiuc.edu/Training/Tutorials/vmd/vmd-tutorial.pdf>)

8. Archivos requeridos para una DM

8.1. Archivos de topología

8.2. Archivos de parámetros

8.3. Archivos myfile.conf para minimizar la estructura proteica calentar, equilibrar y correr simulación

9. Preparación de archivos para correr DM



9.1. Instalación del programa Nanoscale Molecular Dynamics (NAMD):
<https://www.ks.uiuc.edu/Research/namd/>

9.2. Introducción a NAMD a través de su propia documentación:
<https://www.ks.uiuc.edu/Training/Tutorials/namd-index.html>

9.3. Preparación de archivos para el cálculo de una DM

9.4. Generación de archivos tipo .pdb y .psf con VMD

9.5. Solvatación del sistema y generación de archivos .pdb y .psf

9.6. Ionización del sistema y generación de archivos .pdb y .psf

10. Minimización de estructura para DM

10.1. Minimización de los archivos .pdb y .psf

10.2. Preparación del archivo .conf

11. Simulación de DM en NAMD - Parte 1

11.1. Preparación del archivo de minimización de aguas

11.2. Minimización de las aguas

11.3. Minimización del sistema

11.4. Correr simulación NTP para calentamiento y equilibrio

12. Simulación de DM en NAMD - Parte 2

12.1. Edición de *scripts* para simulación NTV y producción de la DM

13. Correr simulación NTV para la producción de la DM

13.1. Análisis de resultados por VMD

13.2. Analizar archivos .psf y .log en VMD

13.3. Discusión de los resultados de RMSD, energías, etc.

14. Análisis de resultados por CARMA

14.1. Obtener e Instalar el programa CARMA:
<https://utopia.duth.gr/glykos/Carma.html>

14.2. Introducción al uso de CARMA a través de su documentación oficial, el manual en: <https://utopia.duth.gr/glykos/pdf/carma.pdf>

- Antiguos estudiantes de Pharbiois, del 5%
- Referidos por antiguos estudiantes de Pharbiois, del 5%
- Asistentes a la Masterclass Gratuita de Fundamentos de Bioinformática, del 20%

Si eres elegible para alguno de estos descuentos, envíanos un correo a ventas@pharbiois.com con el asunto “Descuento Bioinformática PHC02”.

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

Li K, Du Y, Li L, Wei DQ. Bioinformatics Approaches for Anti-cancer Drug Discovery. *Curr Drug Targets*. 2020;21(1):3-17. doi: 10.2174/1389450120666190923162203.

Tao Z, Shi A, Li R, Wang Y, Wang X, Zhao J. Microarray bioinformatics in cancer- a review. *J BUON*. 2017 Jul-Aug;22(4):838-843.

Martínez-Archundia M, Ramírez-Salinas GL, García-Machorro J, Correa-Basurto J. Searching Epitope-Based Vaccines Using Bioinformatics Studies. *Methods Mol Biol*. 2022;2412:471-479. doi: 10.1007/978-1-0716-1892-9_26.

García-Machorro J, Ramírez-Salinas GL, Martínez-Archundia M, Correa-Basurto J. The Advantage of Using Immunoinformatic Tools on Vaccine Design and Development for Coronavirus. *Vaccines (Basel)*. 2022 Oct 31;10(11):1844. doi: 10.3390/vaccines10111844.

Rodríguez-Mera IB, Carrasco-Yépez MM, Vásquez-Moctezuma I, Correa-Basurto J, Salinas GR, Castillo-Ramírez DA, Rosales-Cruz É, Rojas-Hernández S. Role of cathepsin B of *Naegleria fowleri* during primary amebic meningoencephalitis. *Parasitol Res*. 2022 Nov;121(11):3287-3303. doi: 10.1007/s00436-022-07660-y.