

Pharmaceutical and Biotechnological  
Innovation-Services SAS de CV



Registro RENIECYT-CONAHCYT: 2000001

# Curso de acoplamiento molecular (docking) proteína- ligando con ADFR

Validez oficial/curricular de la red SEP-CONOCER ECO 301



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

**Inicia: 3 de febrero del 2024**

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).

Sistemas operativos: Linux, Mac, Windows

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



## Acerca del curso

En este curso aprenderás a preparar archivos y hacer análisis de resultados de acoplamiento molecular proteína-ligando mediante la plataforma ADFR (AutoDock for Flexible Receptors), programa sucesor de Autodock y Autodock vina.

## Programa

### 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

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

# Pharmaceutical and Biotechnological Innovation-Services SAS de CV



- 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
- B. prepare\_ligand

## **VIII. AGFRGUI**

- A. Receptor
- B. Caja (acoplamiento ciego)
- C. Cavidades

# Pharmaceutical and Biotechnological Innovation-Services SAS de CV



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

## **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?

# Pharmaceutical and Biotechnological Innovation-Services SAS de CV



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](mailto:pharmaceuticalandbiotechnology@gmail.com). Pagos por PayPal: [pharmaceuticalandbiotechnology@gmail.com](mailto:pharmaceuticalandbiotechnology@gmail.com) y en la página <https://bit.ly/40IHINn> 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.