

Curso de Docking Proteína-Ligando con Autodock

Acerca de este curso

El docking proteína-ligando con AutoDock es un proceso computacional utilizado en la biología estructural y la química medicinal para predecir cómo una molécula pequeña (el ligando) se unirá a una proteína (el blanco). Este enfoque es crucial para el descubrimiento de fármacos, ya que permite simular y evaluar interacciones entre la proteína y el ligando, ayudando a identificar compuestos que podrían tener actividad biológica.

En un curso de docking proteína-ligando utilizando AutoDock, se aprenderán los siguientes aspectos:

Introducción al Docking Molecular: Conceptos básicos sobre la interacción entre proteínas y ligandos, y la importancia del docking en el diseño de fármacos.

Instalación y Configuración de AutoDock: Cómo instalar y configurar AutoDock y AutoDock Vina en tu sistema.

Preparación de Estructuras: Técnicas para preparar las estructuras de proteínas y ligandos, incluyendo la eliminación de agua, protonación y generación de archivos PDBQT.

Configuración de la Simulación: Cómo definir parámetros de docking, como el tamaño de la caja de búsqueda, tipos de ligandos y opciones de scoring.

Ejecución de Simulaciones de Docking: Cómo ejecutar el proceso de docking y monitorear el progreso.

Análisis de Resultados: Interpretar las salidas de AutoDock, evaluar las poses de unión y calcular la energía de unión, así como identificar interacciones clave.

Visualización de Resultados: Uso de herramientas de visualización molecular (como PyMOL o Chimera) para analizar y representar gráficamente los resultados del docking.

Este curso proporcionará una comprensión sólida de cómo utilizar AutoDock para llevar a cabo estudios de docking y su relevancia en la investigación científica.

Para complementar el aprendizaje teórico, se llevarán a cabo ejercicios prácticos utilizando herramientas especializadas como Autodocktools, que facilitan la visualización y el análisis de resultados. Estas sesiones permitirán a los participantes interpretar los datos de las simulaciones, centrándose en el reconocimiento de interacciones no covalentes entre proteínas y ligandos, habilidades esenciales para quienes desean aplicar el docking en el desarrollo de nuevos fármacos.

Este curso ofrece una formación integral que abarca desde los conceptos básicos hasta la aplicación práctica y el análisis detallado de resultados. Al final, se realizará una actividad integradora en la que los participantes aplicarán los conocimientos adquiridos utilizando una proteína y un ligando de su interés. Con esta experiencia, los asistentes estarán mejor preparados para emplear el acoplamiento molecular proteína-ligando en proyectos de investigación o desarrollo en el ámbito de las ciencias de la vida.

Perfil del aprendiz

Estudiantes o profesionales en disciplinas como biología molecular, bioquímica, farmacología, química, biotecnología o campos afines. Se requiere una familiaridad básica con la biología estructural, la química orgánica y los conceptos de interacción molecular. Tener conocimientos de programación o bioinformática será un valor añadido. Se busca motivación para aprender sobre el diseño de fármacos y las técnicas



computacionales aplicadas en la investigación biomédica. Los participantes deben ser capaces de utilizar software y herramientas informáticas, así como poseer habilidades en la visualización y análisis de datos. Es fundamental la aptitud para interpretar resultados y realizar análisis críticos de interacciones entre proteínas y ligandos. Además, se valorará la disposición para colaborar, ya que el trabajo en proyectos de investigación a menudo requiere interacción multidisciplinaria. Un interés por explorar nuevas tecnologías y enfoques en biología computacional y diseño molecular también es importante. Este perfil permitirá a los aprendices aprovechar al máximo el curso y aplicar los conocimientos adquiridos en sus respectivas áreas de estudio o trabajo.

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 Docking PHC05”.

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 (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 fisicoquímicas
 - 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 excreciónDescripción 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

Instrucciones de registro

1. Realiza tu inversión a través de las plataformas disponibles en:
<https://www.pharbiois.com/inscribirme-docking>

2. Envía el comprobante de pago a ventas@pharbiois.com con el asunto “Inscripción Docking PHC05” (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 Docking Proteína-Ligando, del 20%

Si eres elegible para alguno de estos descuentos, envíanos un correo a ventas@pharbiois.com con el asunto “Descuento Docking PHC05”.

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

1. El-Hachem N, Haibe-Kains B, Khalil A, Kobeissy FH, Nemer G. AutoDock and AutoDockTools for Protein-Ligand Docking: Beta-Site Amyloid Precursor Protein Cleaving Enzyme 1(BACE1) as a Case Study. *Methods Mol Biol.* 2017;1598:391-403. doi: 10.1007/978-1-4939-6952-4_20.
2. <https://omicstutorials.com/a-comprehensive-bioinformatics-tutorial-mastering-ligand-protein-docking-with-autodock/>
3. Forli S, Huey R, Pique ME, Sanner MF, Goodsell DS, Olson AJ. Computational protein-ligand docking and virtual drug screening with



the AutoDock suite. Nat Protoc. 2016 May;11(5):905-19. doi: 10.1038/nprot.2016.051.

4. Agu PC, Afiukwa CA, Orji OU, Ezech EM, Ofoke IH, Ogbu CO, Ugwuja EI, Aja PM. Molecular docking as a tool for the discovery of molecular targets of nutraceuticals in diseases management. Sci Rep. 2023 Aug 17;13(1):13398. doi: 10.1038/s41598-023-40160-2.
5. https://www.scripps.edu/olson/forli/autodock_flex_rings.html