



Acoplamiento molecular (docking) usando Autodock y Vina

Profesorado: Dr. Juan Francisco Cortés Benítez y Dra. Karen Rodríguez Villar

Modalidad: en línea vía Zoom

Fechas: 2 al 4 de octubre de 2023

Cupo máximo: 40 personas

OBJETIVO GENERAL

Mediante el uso de los softwares Autodock y VINA, predecir el modo de unión de un ligando en un receptor.

OBJETIVOS PARTICULARES

- 1) Conocer los conceptos teóricos del modelado molecular y el acoplamiento molecular.
- 2) Manejar adecuadamente el uso de herramientas computacionales para modelar un ligando, así como la preparación de una macromolécula o diana farmacológica de interés.
- 3) Realizar el acoplamiento molecular de un ligando o ligandos en una macromolécula (enzima, receptor, DNA y/o RNA) utilizando el software Vina.
- 4) Interpretar los resultados obtenidos del acoplamiento molecular (pose de unión y energía unión o puntuación del ligando dentro de la macromolécula).
- 5) Conocer la forma en que se reportan los resultados obtenidos en un medio de divulgación.

REQUISITOS Y ANTECEDENTES REQUERIDOS PARA LOS PARTICIPANTES

Alumnos de las licenciaturas de Química, Q.F.B., biología, bioquímica, biotecnología, farmacología o afín que hayan cursado asignaturas o que tengan conocimientos de química orgánica y bioquímica. Estudiantes de posgrado y profesores que tengan conocimiento en las mismas áreas de la ciencia.

Los requerimientos mínimos de cómputo son:

- Computadora laptop o PC
- Sistema operativo Windows 10 o 11 (No MAC)
- Procesador “Intel Core i3”, “AMD A4” o superior
- Memoria RAM de 4 GB
- 15 GB de espacio en disco duro

CONSIDERACIONES IMPORTANTES

En la siguiente liga y código QR encontrarán las instrucciones de instalación de los programas que se van a usar en el curso. Antes de inscribirse se les recomienda revisar la compatibilidad de estos programas con su computadora.

<https://drive.google.com/file/d/1kkOZwnDPBcPAI7H7PxSJdLaxqEJ9evK5/view?usp=sharing>



CONTENIDO TEMÁTICO

2 de octubre	Presentación (14:00 – 14:30 h)
	Bases teóricas del modelado molecular y acoplamiento molecular, así como sus aplicaciones (14:30 – 15:30 h)
	Bases de datos para la obtención de la estructura de los ligandos (15:30 – 16:00 h)
	Bases de datos para obtención de la estructura de macromoléculas (16:00 – 16:30 h)
	Preparación de un ligando utilizando <i>Avogadro</i> (16:30 – 17:00 h)
	Descanso (17:00 – 17:30 h)
	Visualización y preparación de una proteína utilizando <i>PyMOL</i> (17:30 – 18:30 h)
	Minimización de una proteína usando <i>YASARA</i> (18:30 – 19:00 h)
	Preparación del ligando en <i>MGL Tools</i> (18:30 – 19:00 – 19:30 h)
	Dudas generales (19:30 – 20:00 h)
3 de octubre	Procesamiento de la proteína minimizada en <i>YASARA</i> (14:00 – 14:30 h)
	Preparación de la proteína utilizando <i>MGL Tools</i> (14:30 a 15:00 h)
	Búsqueda y generación de un grid (15:00 a 17:00 h)
	Descanso (17:00 – 17:30 h)
	Generación de los archivos necesarios para docking en Autodock mediante <i>MGL Tools</i> (17:30 – 18:00 h)
	Docking con Autodock (18:00 – 19:00 h)
	Análisis de los resultados obtenidos por Autodock (19:00 – 21:00 h)

4 de octubre	Uso de <i>Discovery Studio</i> para generar un mapa de interacciones en 2D (14:00 – 14:30)
	Uso de <i>PyMOL</i> y <i>Discovery Studio</i> para generar imágenes de los docking realizados (14:30 – 15:30)
	Docking con VINA (15:30 – 17:00)
	Descanso (17:00 – 17:30 hrs)
	Análisis de los resultados obtenidos por VINA (17:30 – 18:30 h)
	Validación del docking (18:30 – 19:30)
	Cómo reportar los resultados en un medio de divulgación (19:30 – 20:30 h)
	Dudas generales y clausura (19:30 – 20:00 h)

Dudas y comentarios escribir a: amqomexico@gmail.com

Contacto directo con el profesorado:

Dr. Juan Francisco Cortes Benítez

jcortesb@correo.xoc.uam.mx

Dra. Karen Rodríguez Villar

krodriguezv@correo.xoc.uam.mx

Patrocina



INSTRUMENTOS CIENTÍFICOS
PARA UNA VIDA MEJOR

MERCK



Desarrollo de Especialidades Químicas

