



21ª Reunión
Internacional
de Investigación
en Productos
Naturales

PUEBLA 2026

Dra. Rosa E. del Río Torres | Dr. Roberto Martínez

CURSO PRE-CONGRESO

Simulaciones Computacionales de Interacción Molecular de Productos Naturales

Dr. Ricardo Enrique Buendía Corona

Modalidad
En línea

Duración
20 horas

Formato
Teórico-Práctico

Objetivo

Brindar a las y los participantes herramientas teóricas y prácticas fundamentales en el modelamiento molecular de productos naturales y receptores enzimáticos humanos. El curso abarca la obtención de estructuras desde bases de datos públicas, simulaciones de interacción molecular mediante acoplamiento (docking) y dinámicas moleculares, así como la interpretación y análisis de resultados.

Perfil de Ingreso

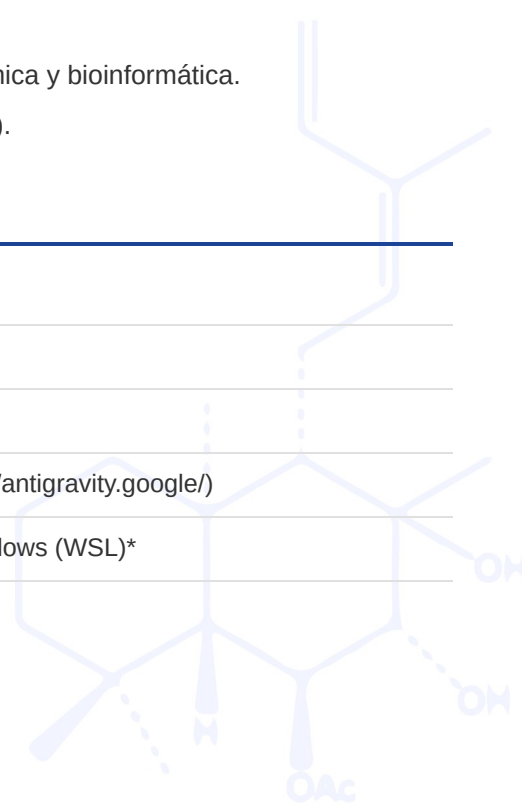
Dirigido a profesionales y estudiantes con:

- Conocimientos básicos de biología molecular, bioquímica, química y bioinformática.
- Manejo básico de línea de comandos (deseable, no obligatorio).

Requisitos Computacionales

Memoria RAM	Mínimo 8 GB
Procesador (CPU)	Al menos 4 núcleos
Sistema Operativo	Windows 10 / 11
IDE (Interfaz de desarrollo)	Antigravity de Google (https://antigravity.google/)
Terminal	Subsistema de Linux en Windows (WSL)*

*Se proporcionará guía de instalación en el anexo correspondiente.





Temario Teórico-Práctico

Fundamentos

1. Introducción al modelado molecular
2. Atlas de Productos Naturales (NPATLAS)
3. Protein Data Bank (PDB)
4. Cristalografía de rayos X
5. Resonancia Magnética Nuclear
6. Criomicroscopía electrónica

Métodos Computacionales

1. Química computacional
2. Docking molecular
3. Simulaciones de dinámica molecular
4. Análisis e interpretación de resultados
5. Visualización de interacciones
6. Aplicaciones científicas

Perfil de Egreso

Al finalizar el curso, las y los participantes serán capaces de manipular modelos atomísticos de productos naturales y biomoléculas funcionales, como enzimas humanas, para el reconocimiento de interacciones moleculares. Podrán diseñar y ejecutar experimentos in silico, así como comunicar hallazgos con rigor y aplicación científica.



**“Nos vemos
en Puebla...”**

