



Guía de Trabajo: Introducción a la Química Computacional

Dr. Jesus Alvarado Huayhuaz

Duración total: 3 horas

Nivel: Básico

Fecha: 8 de octubre del 2025

Objetivo General

Familiarizar al estudiante con las herramientas fundamentales de la química computacional, desde la escritura y visualización de moléculas hasta la exploración de interacciones ligando-receptor y el acoplamiento molecular, utilizando entornos libres como Google Colab y PyMOL.

Parte A: Escritura y visualización de moléculas en código SMILES

Duración: 40 minutos

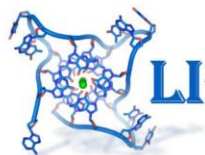
En esta sección, los estudiantes aprenderán a representar moléculas mediante la notación SMILES (Simplified Molecular Input Line Entry System) y a visualizarlas tridimensionalmente empleando las bibliotecas Open Babel y RDKit en Google Colab.

Material de referencia:

https://github.com/inefable12/herramientas_basicas/blob/main/0_RDKIT_OpenBabel_disenho_preopt.ipynb

Actividades:

- Acceder al cuaderno de trabajo en Google Colab.
- Aprender a escribir estructuras usando SMILES.
- Visualizar las moléculas generadas utilizando RDKit
- Realizar “optimización molecular” empleando Open Babel.
- Exportar las estructuras a formato .mol o .pdbqt para uso posterior.



LIBIPMET



Parte B: Visualización de proteínas en el PDB RCSB mediante PyMOL

Duración: 40 minutos

En esta parte, los estudiantes explorarán estructuras proteicas depositadas en la base de datos Protein Data Bank (PDB RCSB), utilizando el programa PyMOL para su visualización tridimensional.

Actividades:

- Buscar una proteína de interés en el sitio web del PDB RCSB.
- Descargar el archivo correspondiente en formato .pdb.
- Abrir el archivo en PyMOL y explorar sus dominios estructurales.
- Identificar posibles sitios de unión para ligandos.

Parte C: Visualización de interacciones ligando-receptor y docking molecular

Duración: 40 minutos

En esta sección, se abordará la representación y análisis de complejos ligando-receptor, utilizando estructuras disponibles en el PDB RCSB. Además, se realizará un ejercicio práctico de acoplamiento molecular con la proteína 6w63 empleando AutoDock Vina.

Material de referencia:

https://github.com/inefable12/herramientas_basicas/blob/main/Docking_Molecular_VINA.ipynb

Actividades:

- Visualizar las interacciones del complejo cisplatino-ADN (1AIO, 1CKT, etc.)
- Descargar la estructura de la proteína 6w63 desde el PDB RCSB.
- Cargar la proteína y el ligando en el entorno de trabajo.
- Definir la caja de acoplamiento (grid box) en función del sitio activo.
- Ejecutar AutoDock Vina y analizar los resultados del acoplamiento.
- Visualizar las interacciones utilizando PyMOL.

Parte D: Desafío de acoplamiento molecular

Duración: 30 minutos

En esta actividad, los estudiantes deberán identificar/diseñar la molécula con el mejor puntaje de acoplamiento dentro de la caja del receptor asignado por el docente. El desafío busca evaluar la comprensión práctica del proceso de docking y la interpretación de los resultados energéticos.

Indicaciones específicas serán proporcionadas por el docente durante la sesión.



Parte E: Retroalimentación y conversatorio

Duración: 30 minutos

Durante esta última parte, se llevará a cabo una sesión de retroalimentación sobre el desafío y un conversatorio acerca de las tendencias actuales en simulaciones moleculares. Se abordarán temas como el uso de inteligencia artificial en el diseño racional de fármacos, aprendizaje profundo para predicción de afinidad y la integración de modelos de docking con algoritmos generativos.

Publicaciones del autor:

Topics: Molecular Deep Learning in Drugs [2025]

- CACHE Challenge #2: Targeting the RNA Site of the SARS-CoV-2 Helicase Nsp13
Journal of Chemical Information and Modeling (JCIM)
DOI: 10.1021/acs.jcim.5c00535

Topics: Deep Learning & Molecular Docking Simulations [2024]

- Artificial Neural Networks for the Rapid Prediction of Possible Ferroptosis Inducers Using the GPx4 Enzyme <https://doi.org/10.1109/CIBCB58642.2024.10702169>

Topic: Spectroscopy & Molecular Dynamics Simulations [2024]

- Benzohydroxamate and nitrobenzohydroxamate affect membrane order: Correlations between spectroscopic and molecular dynamics to approach tuberculosis
<https://doi.org/10.1016/j.bbamem.2024.184378>

Topic: Quantum Mechanics & Molecular Docking [2024]

- Deciphering the Molecular Interaction Process of Gallium Maltolate on SARS-CoV-2 Main and Papain-Like Proteases: A Theoretical Study
<https://doi.org/10.3390/biophysica4020013>

Topic: Quantum Mechanics & Molecular Dynamics [2023]

- Reconocimiento molecular de complejos de desferrioxamina con aluminio, galio y hierro en el receptor FHUE: Un estudio silico.
<https://doi.org/10.37761/rsqp.v89i1.425>



Topic: Databases & Molecular Docking [2023]

- Caracterización del aceite esencial de *Clinopodium revolutum* y estudio computacional de sus compuestos bioactivos contra el cáncer <https://doi.org/10.37761/rsqp.v89i1.421>

Topic: Molecular Machine Learning & Molecular Docking [2022]

- Search for Zinc Complexes with High Affinity in PZase from *Mycobacterium Tuberculosis* Resistant to PZA https://doi.org/10.1007/978-3-031-21175-1_12
- Búsqueda de complejos de Fe con potencial actividad vía el Efecto caballo de Troya en *Escherichia coli* <https://doi.org/10.33017/RevECIPeru2021.0013/>

Others in Bioinorganic, Bioinformatics and Quantum Mechanics Calculations

- Natural Products as Potential Inhibitors for SARS-CoV-2 PLpro https://doi.org/10.1007/978-3-030-65775-8_25
- In-silico study of antituberculosis activity of Zn-pyrazinamide in PZase DOI: 10.21826/viiiseedmol2020-89
- In Silico Studies of the Biomolecular Interactions Between Natural Products and SARS-CoV-2 Main Protease DOI: 10.26434/chemrxiv.13065206
- Manual de Procedimientos Básicos de Química Cuántica Computacional DOI: 10.13140/RG.2.2.30461.10722
- The Hydrophobic Iron Chelator Desferrioxamine-Caffeine, DFCAF <https://doi.org/10.1002/ajh.24812>
- Desferrioxamine and desferrioxamine-caffeine as carriers of Al and Ga to microbes via the Trojan Horse Effect <https://doi.org/10.1016/j.jtemb.2017.01.006>