

Aspectos generales

Título:	Descubrimiento de Productos Naturales: análisis bioinformáticos para principiantes
Semestre:	2026-1
Sede:	Instituto de Química, UNAM
Horario:	Martes y Jueves de 10 a 12
No. sesiones:	16
Duración de la sesión:	4.00
Cupo total:	20
Observaciones:	Se necesita traer una laptop para la parte práctica.

Tutor responsable

Nombre:	CORINA-DIANA CEAPA
Entidad:	Instituto de Química
Email:	corina.ceapa@iquimica.unam.mx
Teléfono:	555556224770

Métodos de evaluación

MÉTODO	CANTIDAD	PORCENTAJE
Examen parcial	2	40%
Presentación de proyecto	1	60%

Integrantes

INTEGRANTE	ROL	HORAS	ACTIVIDAD COMPLEMENTARIA
CAROL SISETH MARTÍNEZ CABALLERO	Responsable	32.00	
CORINA-DIANA CEAPA	Responsable	32.00	
		64/64	

Introducción

Proponemos para los alumnos del posgrado el curso "Descubrimiento de Productos Naturales: Análisis Bioinformáticos para Principiantes". Este curso/taller de 64 horas está diseñado para ofrecer una combinación equilibrada de conocimientos teóricos y prácticos en bioinformática. Tanto si se inicia en el campo como si busca profundizar en sus conocimientos, este curso le guiará a través de los conceptos y técnicas esenciales.

El curso está justificado para los alumnos del posgrado, ya que muchos proyectos modernos proponen una intersección entre la biología y la ciencia computacional. Para ello, dominar el análisis de secuencias y la navegación en bases de datos bioinformáticas son habilidades esenciales para identificar y caracterizar productos naturales. Las proteínas desempeñan un papel vital en los procesos biológicos y, los alumnos aprenderán a analizar las secuencias y estructuras de las proteínas, lo cual es clave para comprender sus funciones e interacciones. Los análisis de genomas y metagenomas completos proporcionan información sobre la composición genética, así como la evolución y adaptación de los organismos y sus comunidades. Esto conlleva a aplicaciones prácticas de estos análisis en el descubrimiento de productos naturales. La metabolómica es el estudio de los procesos químicos que involucran metabolitos. Vamos a necesitar explorar también técnicas para analizar perfiles metabólicos, que son cruciales para la identificación de compuestos bioactivos.

Al finalizar este curso, los participantes tendrán un conocimiento sólido de las herramientas y técnicas bioinformáticas, lo que le permitirá contribuir al descubrimiento de nuevos productos naturales.

Objetivos

Dotar a los estudiantes de las habilidades necesarias para utilizar herramientas bioinformáticas sencillas y gratuitas, con el fin de realizar un análisis integrador de genes, proteínas y genomas, centrándose en los componentes genéticos implicados en el descubrimiento de metabolitos en procariontas.

Resultados del curso: Al final del curso, los estudiantes serán capaces de:

- Identificar la función de genes desconocidos.

- Anota los genomas bacterianos.
- Comparar genes y genomas.
- Construye árboles filogenéticos.
- Modele proteínas a partir de secuencias utilizando herramientas bioinformáticas de libre acceso.

Objetivos Específicos:

1. Analizar secuencias de nucleótidos utilizando herramientas bioinformáticas (consultas a bases de datos, alineación de secuencias, predicción de secuencias promotoras, análisis filogenéticos, diseño de oligonucleótidos, etc.).
2. Analizar secuencias de aminoácidos utilizando herramientas bioinformáticas (consultas a bases de datos, alineación de secuencias, predicción de motivos conservados, hidrofobicidad, modificaciones postraduccionales, construcción de árboles filogenéticos basados en funciones, etc.).
3. Realice minería de genes y genoma/metagenoma para la genómica comparativa, incluido el mapeo del metabolismo, las comparaciones de proteomas, las comparaciones de proteomas y la detección especializada de metabolitos.
4. Realizar análisis metabolómicos de genomas.

Temario**1. Introducción a la Bioinformática (8 horas) - ambas tutoras**

- Informática Aplicada a la Bioquímica y Biotecnología
- Secuenciación de macromoléculas: ADN y proteínas
- Algoritmos y plataformas para anotaciones de genes y genomas (RAST, PGAP)
- Bases de datos biológicas
 - Motores de búsqueda para análisis bioinformáticos
 - Características y formatos de FASTA, PDB, etc.
 - Búsqueda de secuencias de ácidos nucleicos y proteínas (ExpASy, NCBI, EMBL)

1. Alineación de secuencias (8 horas) - Dra. Carol Siseth Martínez Caballero

- Semejanza, homología e identidad
- Alineación entre pares de secuencias
 - Matrices de datos
 - Interpretación Estadística y Biológica
 - Uso de la herramienta BLAST
 - Parámetros de búsqueda
 - Interpretación de los valores E, la identidad y la cobertura
- Alineación de múltiples secuencias
 - Algoritmos (MUSCLE, Clustal W)
 - Modelos ocultos de Markov
 - Relación entre los valores E y el índice de probabilidad
- Preparación e Interpretación de Árboles de Agrupamiento (MEGA)
 - Métodos de distancia (UPGMA, unión de vecinos)
 - Máxima verosimilitud
 - Máxima parsimonia

1. Análisis de proteínas (10 horas) - Dra. Carol Siseth Martínez Caballero

- Motivos y dominios de proteínas (HMMR, ProtParam, InterProScan, SignalP, PsortB, SwissProt/UniProt, CAZy, Pfam)
- Predicción de Estructuras Secundarias
- Predicción de Estructuras Terciarias
 - Modelado Ab Initio (Rosetta, Folding, Zhang Lab, AlphaFold)
 - Modelado de homología (Phyre2, I-TASSER, SwissModel, QUARK)
 - Roscado (MUSTER, SEGMENT)
- Validación de Modelos Construidos (ProSA, PROCHECK)
- Visualización molecular (PyMOL, UCSF Chimera)
- *Purificación de proteínas in silico*
- Cálculo de parámetros fisicoquímicos (peso molecular, punto isoeléctrico, coeficiente de extinción molar)
- Predicción de hidrofobicidad, modificaciones postraduccionales, regiones antigénicas, péptido señal

1. Análisis de genomas completos y metagenomas y sus aplicaciones prácticas (18 horas) - Dra. Corina Diana Ceapa

- Navegadores genómicos (Visor Genoma Integrado, EMBL-EBI, PATRIC)
- Sitios en línea gratuitos con múltiples herramientas (PATRIC, Expasy, EMBL-EBI)
- Comparaciones de proteomas (RAST)
- Detección de metabolitos secundarios (AntiSMASH, Prism)

1. Análisis metabolómicos (8 horas) - Dra. Corina Diana Ceapa

- Mapeo Metabólico de Genomas (KEGG, Biocyc)

1. Seguimiento y evaluación de proyectos (8 horas) - ambas tutoras

Además, se organizarán seminarios y una sesión de networking para el trabajo realizado en los dos laboratorios del IQ, UNAM, con ejemplos prácticos de análisis bioinformáticos publicados por las dos tutoras en revistas indexadas. - **4 horas**

Bibliografía

Bioinformática General

1. **Bioinformática: Análisis de secuencias y genomas** por David W. Mount
2. **Bioinformática para dummies** por Jean-Michel Claverie y Cedric Notredame
3. **Introducción a la Bioinformática** por Arthur Lesk

Análisis de secuencias de nucleótidos

1. **Herramientas bioinformáticas para el análisis de secuencias de ADN** - Inicio de Bioinformática[1]
2. **Bases de datos, software y herramientas bioinformáticas con usos** - Notas de microbios[2]
3. **Herramientas bioinformáticas para el análisis de secuencias** - Tutoriales de ómica[3]

Análisis de secuencia de aminoácidos

1. **Expasy - ProtParam** - Expansivo[4]
2. **SIB Instituto Suizo de Bioinformática | Pasión** - Expansivo[5]

Minería de genes y genomas para la genómica comparativa

1. **La integración de la minería del genoma, la genómica comparativa y la genética funcional para la identificación de grupos de genes biosintéticos** - Fronteras en genética[6]
2. **Genómica Comparativa** - Universidad Estatal de Pensilvania[7]

Análisis de metabolómica

1. **Modelos a escala genómica en metabolómica humana** - Nature Reviews Genética[8]
2. **La metabolómica fúngica impulsada por la bioactividad identifica análogos de temibles antiproliferativos y su grupo de genes biosintéticos** - Metabolómica[9]
3. **Referencias para las herramientas de metabolómica** [10-16]

Referencias

[1] 67 Herramientas Gratuitas de Análisis de Secuencias de ADN - Software y Recursos

[2] Bases de datos, software y herramientas bioinformáticas con usos - Microbe Notes

[3] Herramientas bioinformáticas para el análisis de secuencias - Tutoriales de ómica

[4] Expasy - ProtParam

[5] SIB Instituto Suizo de Bioinformática | Pasión

[6] La integración de la minería del genoma, la genómica comparativa y la ...

[7] Genómica Comparativa - Universidad Estatal de Pensilvania

[8] Modelos a escala genómica en metabolómica humana - Nature

[9] La metabolómica fúngica impulsada por la bioactividad identifica ...

[10] Caesar, L. K., Montaser, R., Keller, N. P., & Kelleher, N. L. (2021). Metabolómica y genómica en la investigación de productos naturales: Herramientas complementarias para la dirección de nuevas entidades químicas. En *Natural Product Reports* (Vol. 38, Número 11, pp. 2041-2065). Real Sociedad de Química. <https://doi.org/10.1039/d1np00036e>

[11] Aron, A. T., Gentry, E. C., McPhail, K. L., Nothias, L. F., Nothias-Esposito, M., Bouslimani, A., Petras, D., Gauglitz, J. M., Sikora, N., Vargas, F., van der Hooft, J. J. J., Ernst, M., Kang, K. bin, Aceves, C. M., Caraballo-Rodríguez, A. M., Koester, I., Weldon, K. C., Bertrand, S., Roullier, C., Dorrestein, P. C. (2020). Redes moleculares reproducibles de datos de espectrometría de masas no dirigidos utilizando GNPS. *Protocolos de la Naturaleza*, 15(6), 1954-1991. <https://doi.org/10.1038/s41596-020-0317-5>

[12] Wang, M., Carver, J. J., Phelan, V. v., Sánchez, L. M., Garg, N., Peng, Y., Nguyen, D. D., Watrous, J., Kapon, C. A., Luzzatto-Knaan, T., Porto, C., Bouslimani, A., Melnik, A. V., Meehan, M. J., Liu, W. T., Crüsemann, M., Boudreau, P. D., Esquenazi, E., Sandoval-Calderón, M., ... Bandeira, N. (2016). Intercambio y curación comunitaria de datos de espectrometría de masas con Global Natural Products Social Molecular Networking. En *Nature Biotechnology* (Vol. 34, Número 8, pp. 828-837). Grupo Editorial Naturaleza. <https://doi.org/10.1038/nbt.3597>

- [13] Caesar, L. K., Montaser, R., Keller, N. P., & Kelleher, N. L. (2021). Metabolómica y genómica en la investigación de productos naturales: Herramientas complementarias para la dirección de nuevas entidades químicas. En *Natural Product Reports* (Vol. 38, Número 11, pp. 2041-2065). Real Sociedad de Química. <https://doi.org/10.1039/d1np00036e>
- [14] Flores-Bocanegra, L., al Subeh, Z. Y., Egan, J. M., El-Elimat, T., Raja, H. A., Burdette, J. E., Pearce, C. J., Linington, R. G., & Oberlies, N. H. (2022). Dereplicación de metabolitos fúngicos mediante redes de compuestos basadas en RMN utilizando MADByTE. *Revista de Productos Naturales*, 85(3), 614–624. <https://doi.org/10.1021/acs.jnatprod.1c00841>
- [15] Nothias, L. F., Petras, D., Schmid, R., Dührkop, K., Rainer, J., Sarvepalli, A., Protsyuk, I., Ernst, M., Tsugawa, H., Fleischauer, M., Aicheler, F., Aksenov, A. A., Alka, O., Allard, P. M., Barsch, A., Cachet, X., Caraballo-Rodríguez, A. M., da Silva, R. R., Dang, T., Dorrestein, P. C. (2020). Redes moleculares basadas en características en el entorno de análisis GNPS. *Métodos de la Naturaleza*, 17(9), 905–908. <https://doi.org/10.1038/s41592-020-0933-6>
- [16] Eldjarn, G. H., Ramsay, A., van der Hooft, J. J. J., Duncan, K. R., Soldatou, S., Rousu, J., Daly, R., Wandy, J., & Rogers, S. (2021). Clasificación de los enlaces metabolómicos y genómicos microbianos en el marco NPLinker utilizando funciones de puntuación complementarias. *PLoS Biología Computacional*, 17(5 de mayo). <https://doi.org/10.1371/journal.pcbi.1008920>.