TP2

Obtención y manejo de bibliotecas químicas

Objetivos

1) Obtener sets de datos de compuestos químicos
2) Aprender a trabajar con tablas de compuestos
3) Realizar limpieza y normalización de datos químicos

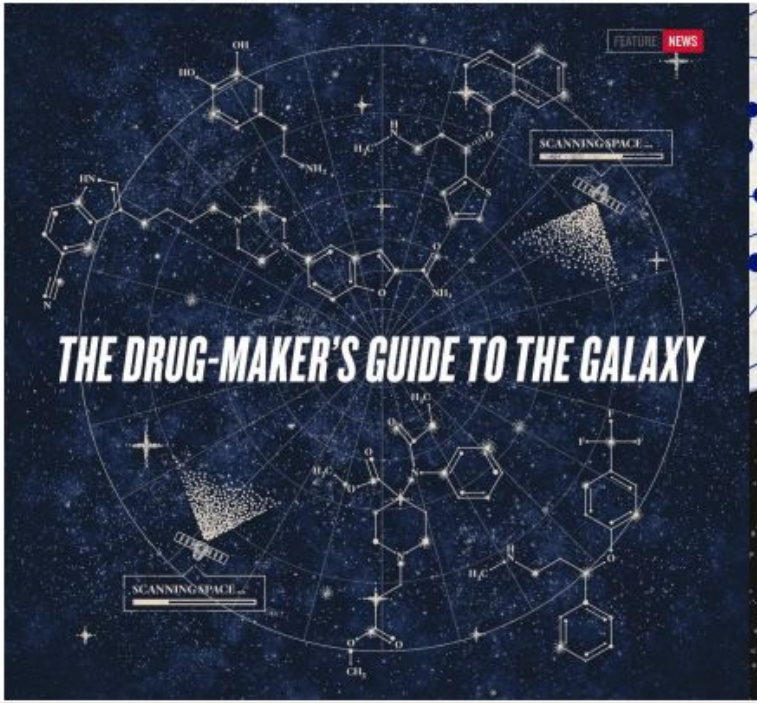
Organización de la clase

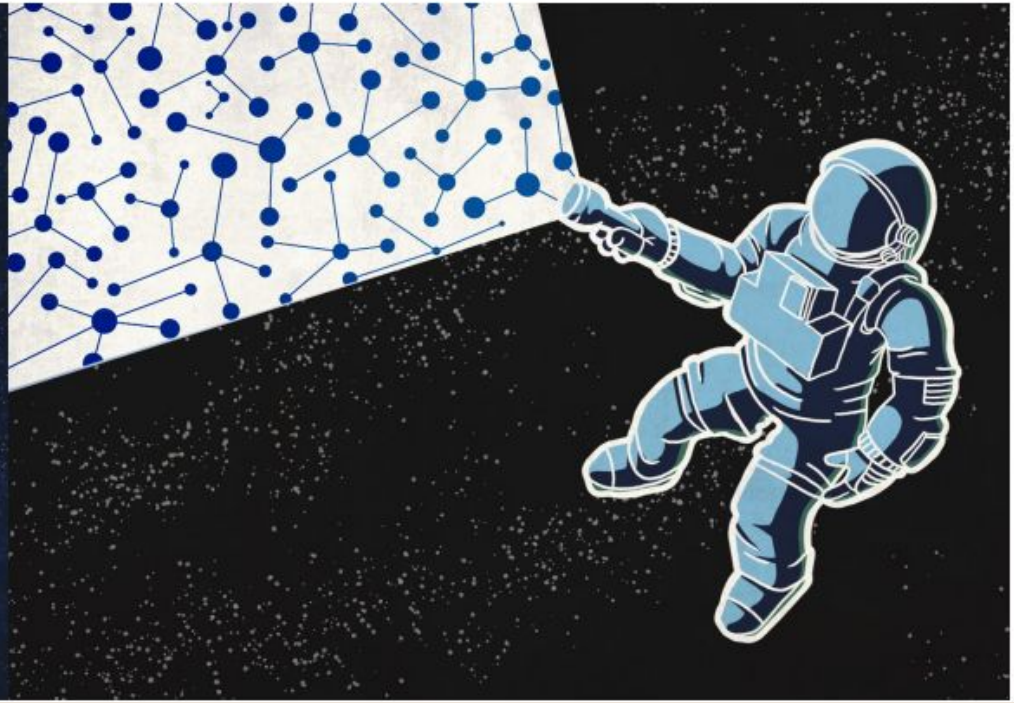
9:00 a 9:30	Introducción al TP
9:30 a 10:30	Trabajo en la guía de ejercicios (Parte 1: Obtención de datos)
10:30 a 11:00	Recreo
11:00 a 12:00	Trabajo en la guía de ejercicios (Parte 2: Análisis de conjuntos de datos)
12:00 a 13:00	Lectura de paper y puesta en común

Espacio Químico

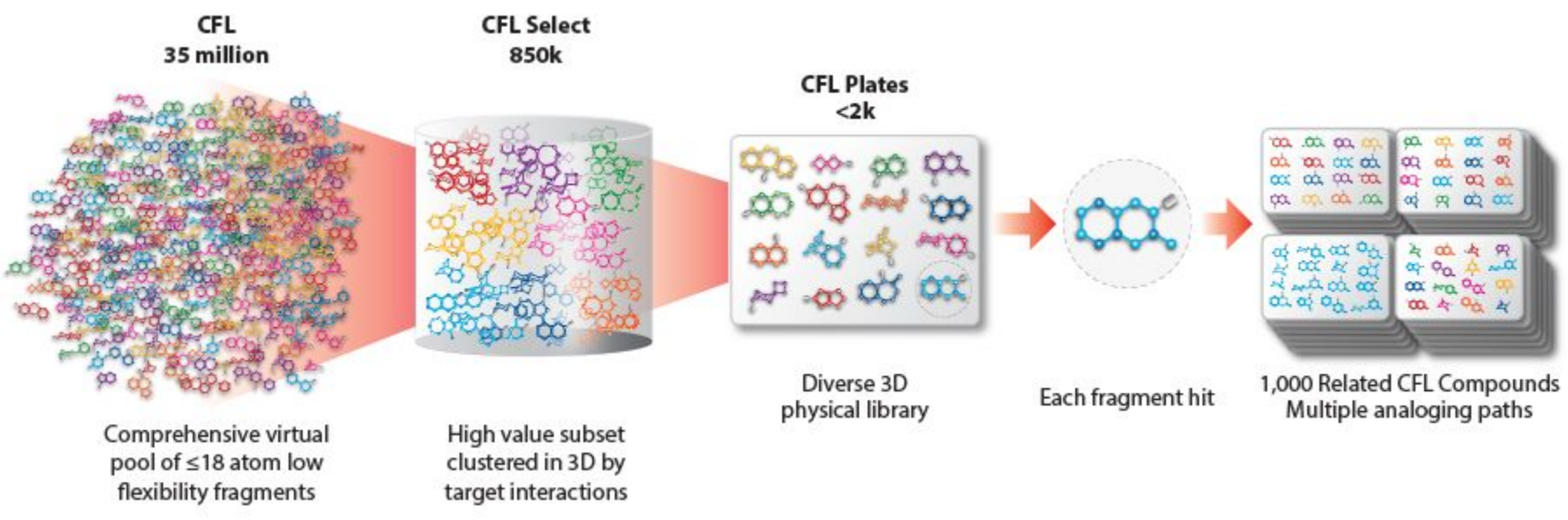
Mullard A. The drug-maker's guide to the galaxy. Nature. 2017 549(7673):445-447. doi: 10.1038/549445a. PMID: 28959982.

https://extrapolations.com/what-is-chemical-space/

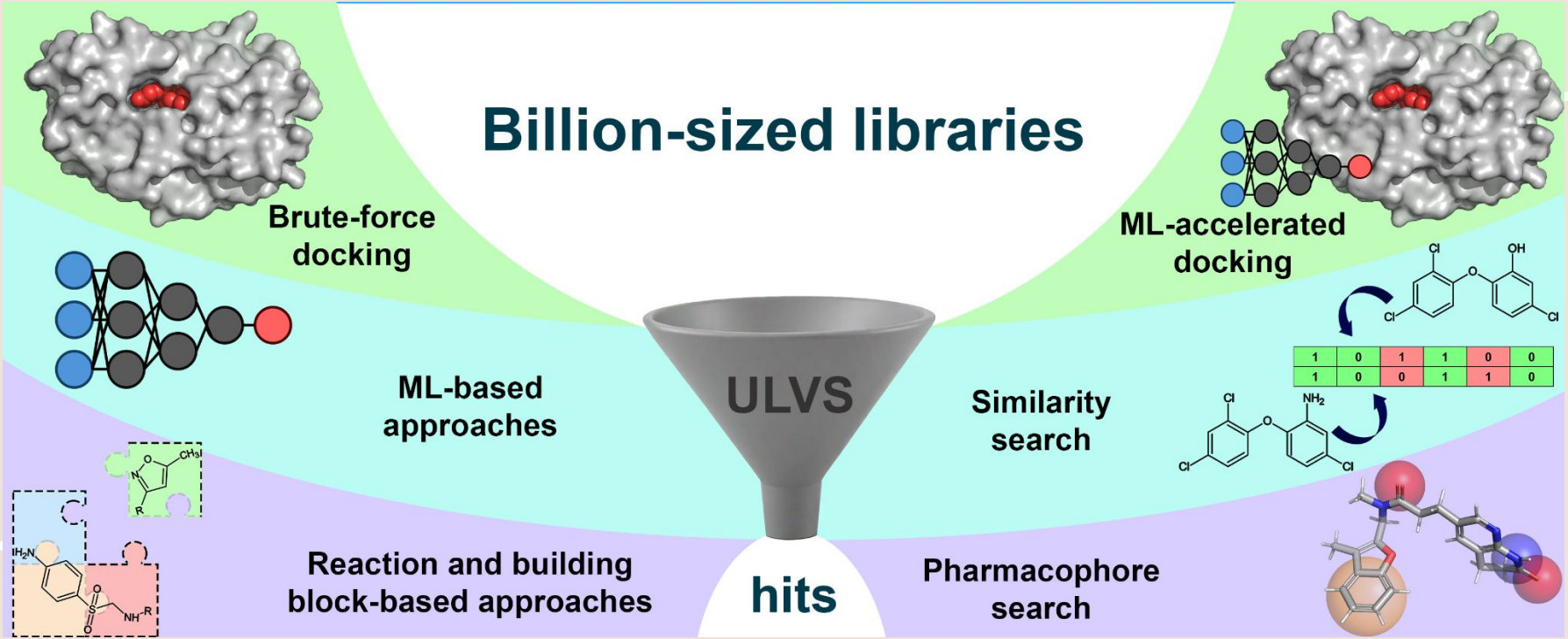




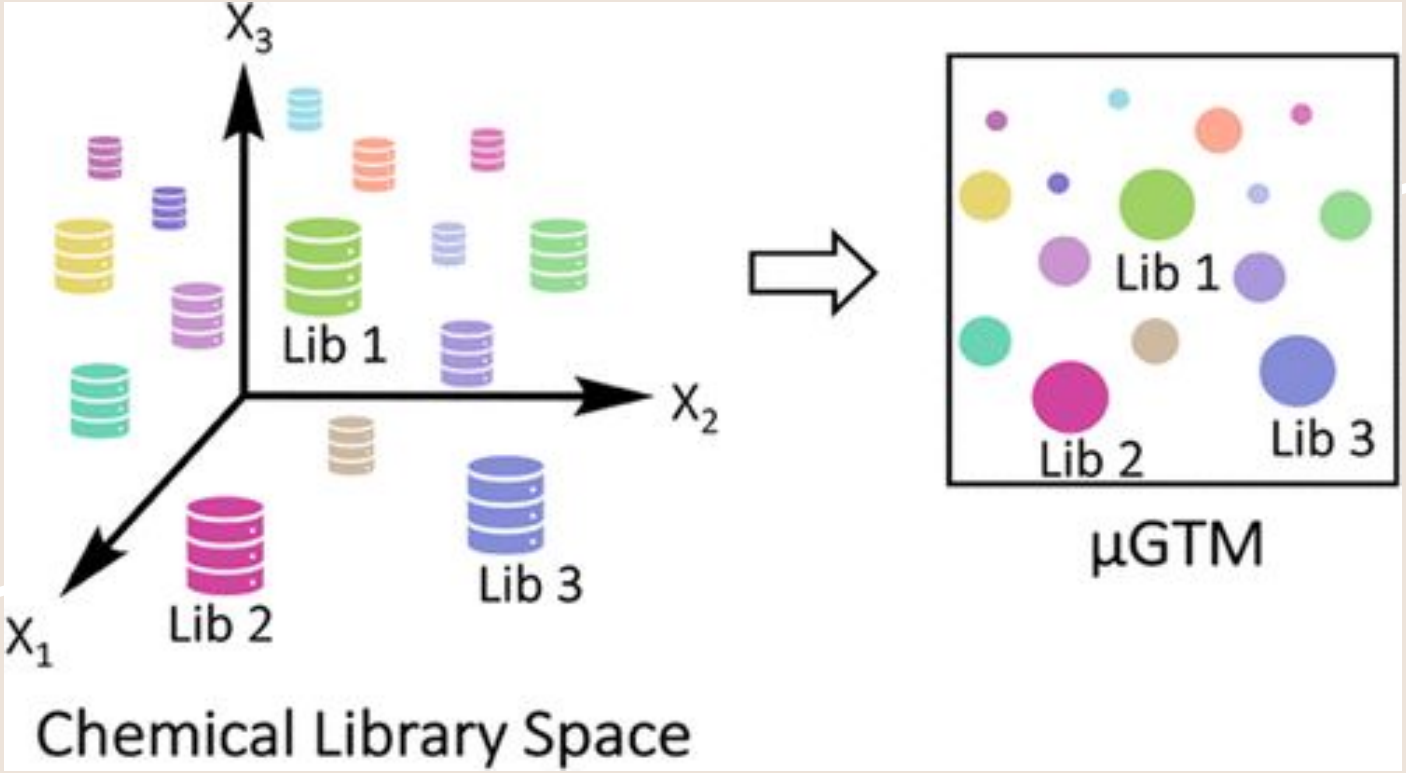
Espacio Químico



Construcción de librerías químicas



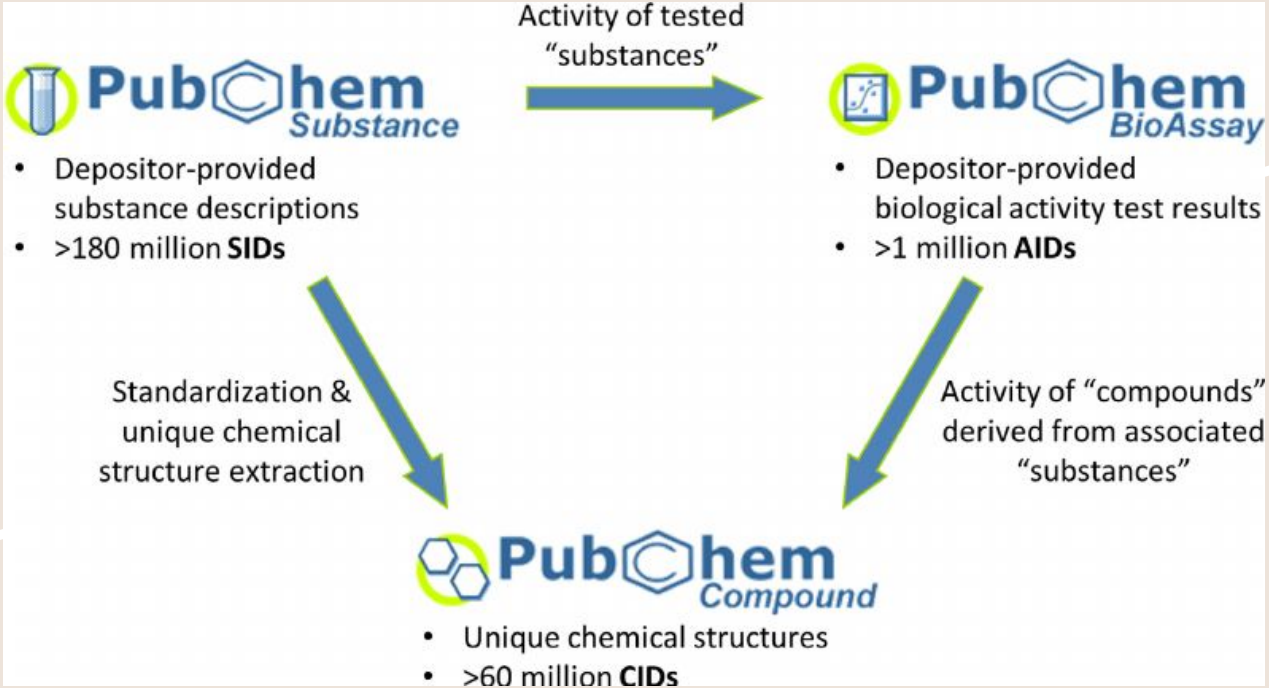
Construcción de librerías químicas



Base de Datos

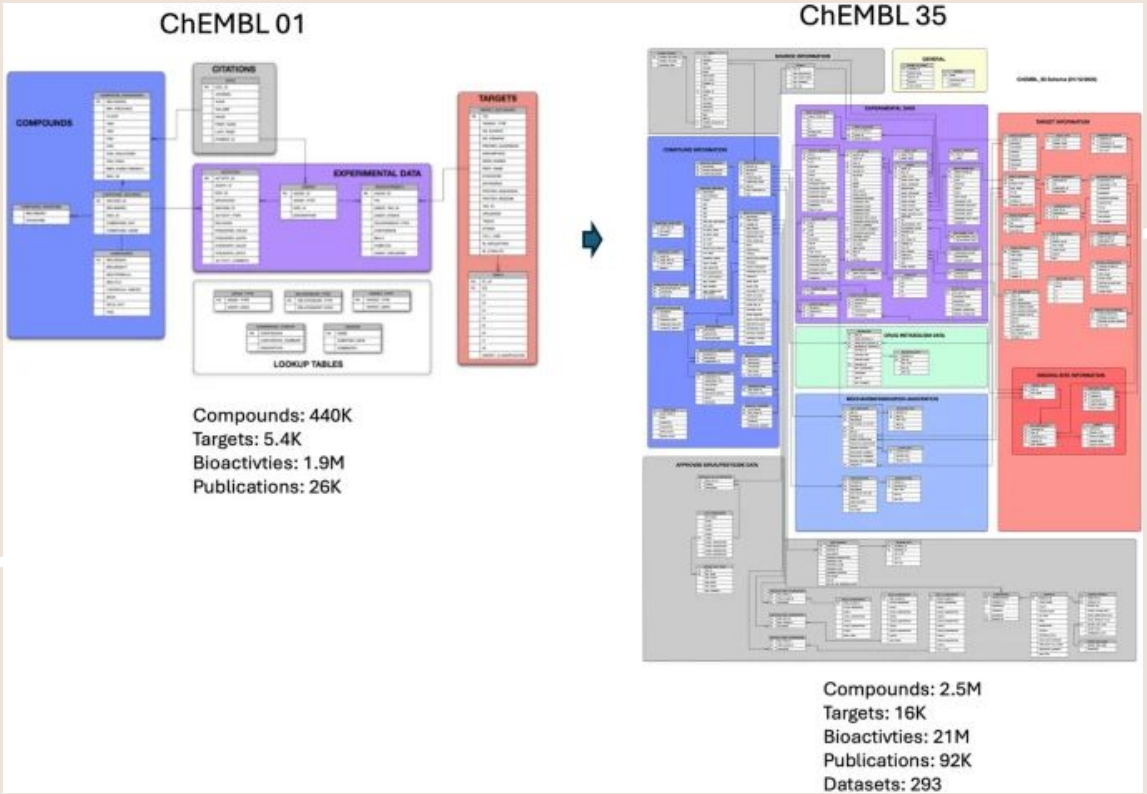
Vs

Base de Datos

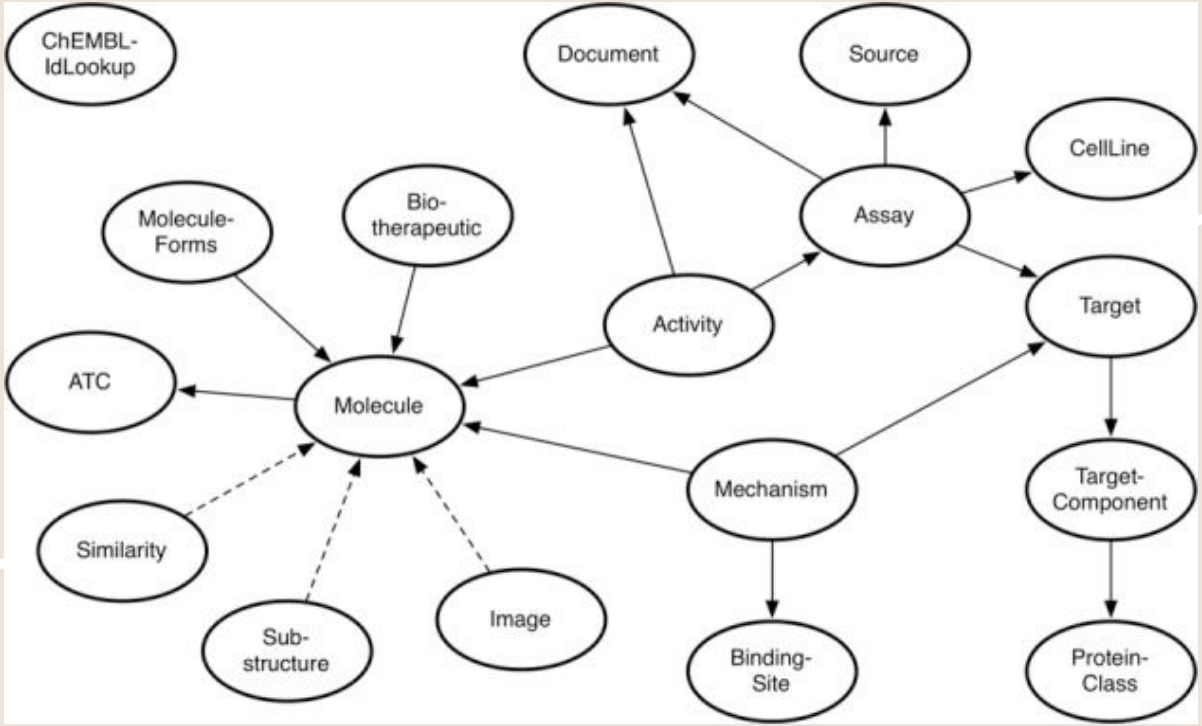


https://academic.oup.com/nar/article/43/W1/W605/2467896?login=false

Base de Datos



Base de Datos

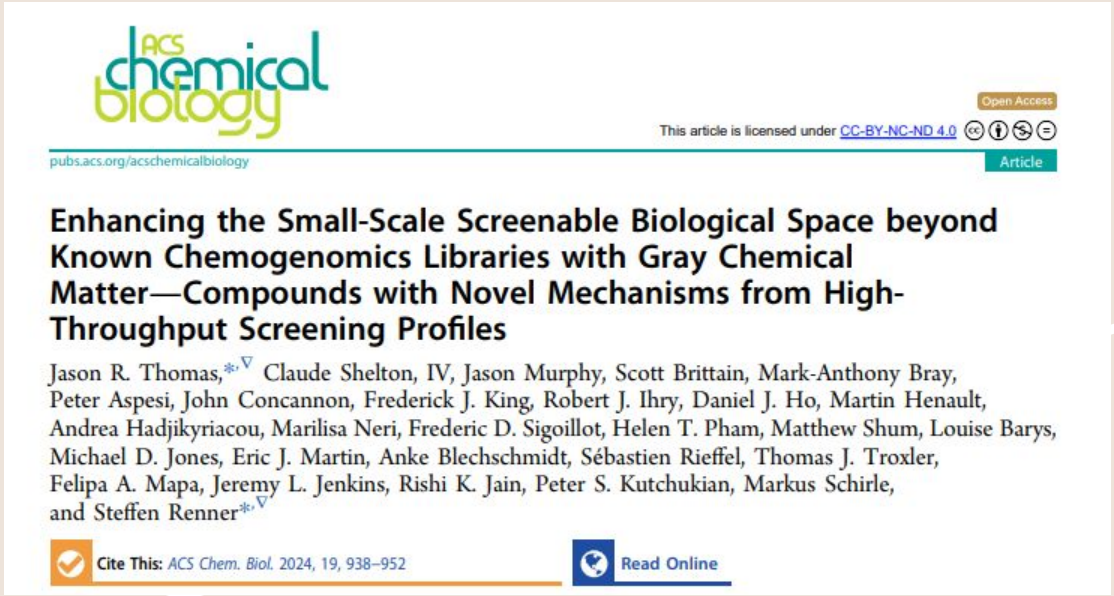


https://pmc.ncbi.nlm.nih.gov/articles/PMC4489243/

Limpieza de datos!

Para todo trabajo bioinformático es fundamental el tratamiento de los datos para descartar valores nulos y repetidos.

Cierre



ACS chemical biology

Open Access

pubs.acs.org/acschemicalbiology

Article

Enhancing the Small-Scale Screenable Biological Space beyond Known Chemogenomics Libraries with Gray Chemical Matter—Compounds with Novel Mechanisms from High-Throughput Screening Profiles

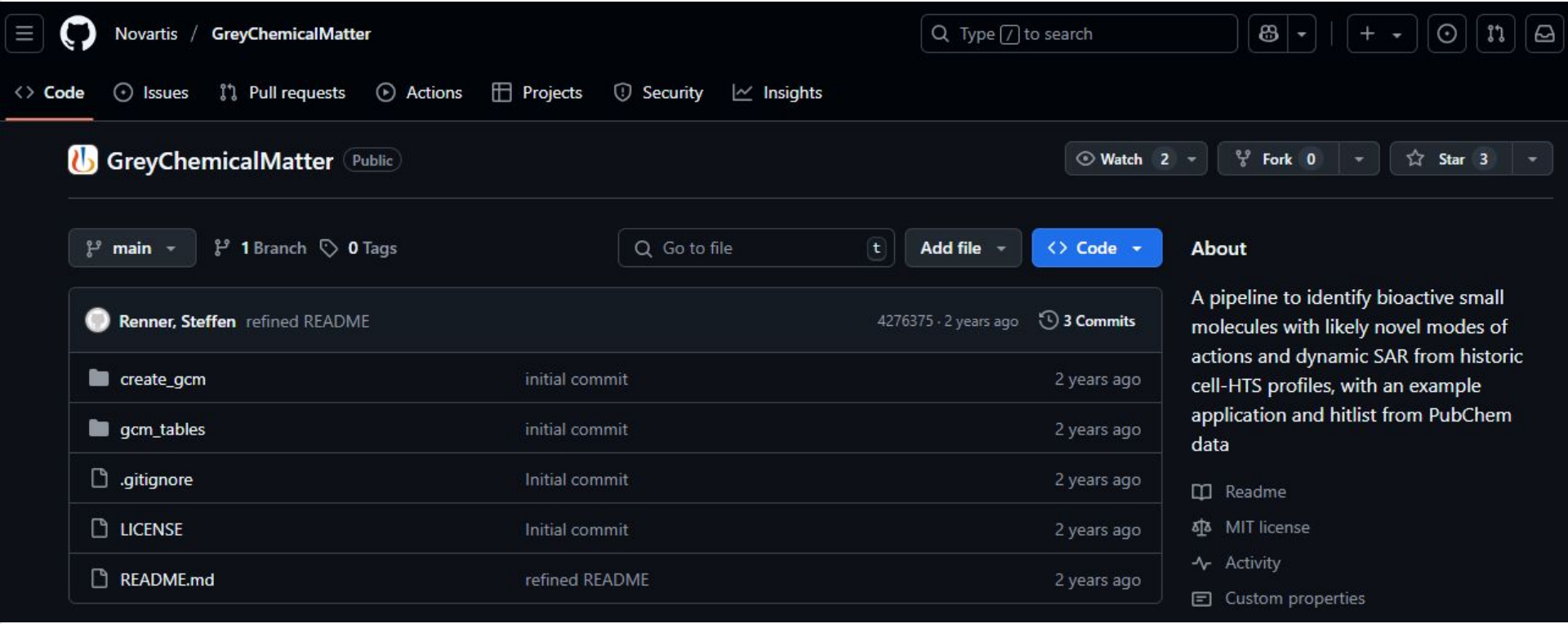
Jason R. Thomas,*,▽ Claude Shelton, IV, Jason Murphy, Scott Brittain, Mark-Anthony Bray, Peter Aspesi, John Concannon, Frederick J. King, Robert J. Ihry, Daniel J. Ho, Martin Henault, Andrea Hadjikyriacou, Marilisa Neri, Frederic D. Sigoillot, Helen T. Pham, Matthew Shum, Louise Barys, Michael D. Jones, Eric J. Martin, Anke Blechschmidt, Sébastien Rieffel, Thomas J. Troxler, Felipa A. Mapa, Jeremy L. Jenkins, Rishi K. Jain, Peter S. Kutchukian, Markus Schirle, and Steffen Renner*,▽

Cite This: *ACS Chem. Biol.* 2024, 19, 938–952

Read Online

https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acschembio.3c00737?ref=PDF

Repositorio



https://github.com/Novartis/GreyChemicalMatter

Objetivos

1) Obtener sets de datos de compuestos químicos
2) Aprender a trabajar con tablas de compuestos
3) Realizar limpieza y normalización de datos químicos