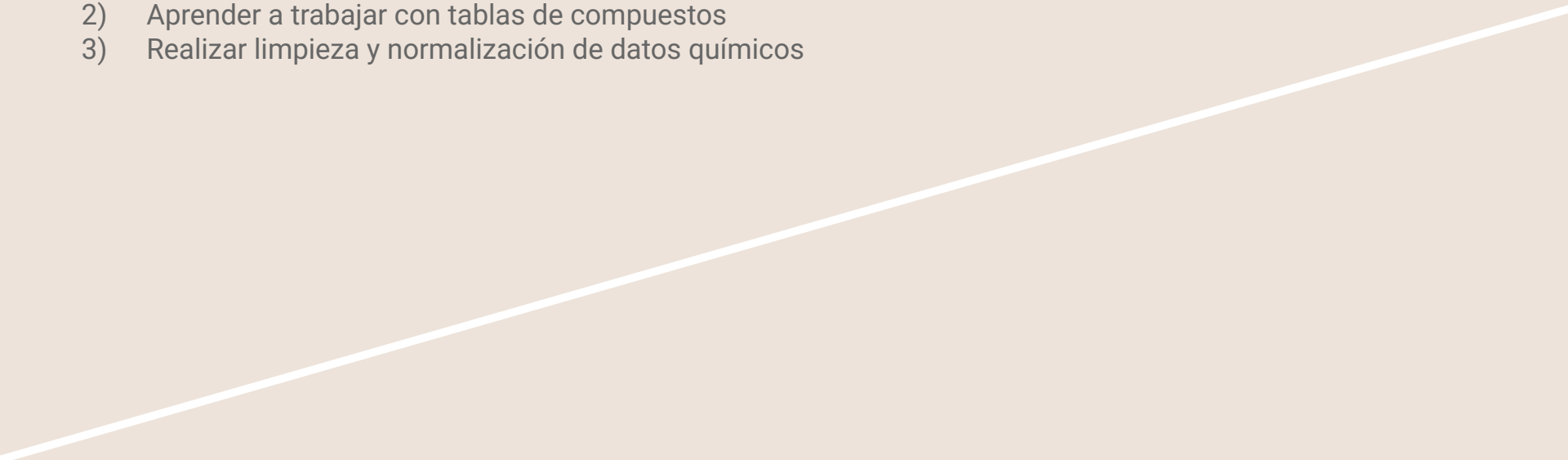


TP2

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
- 

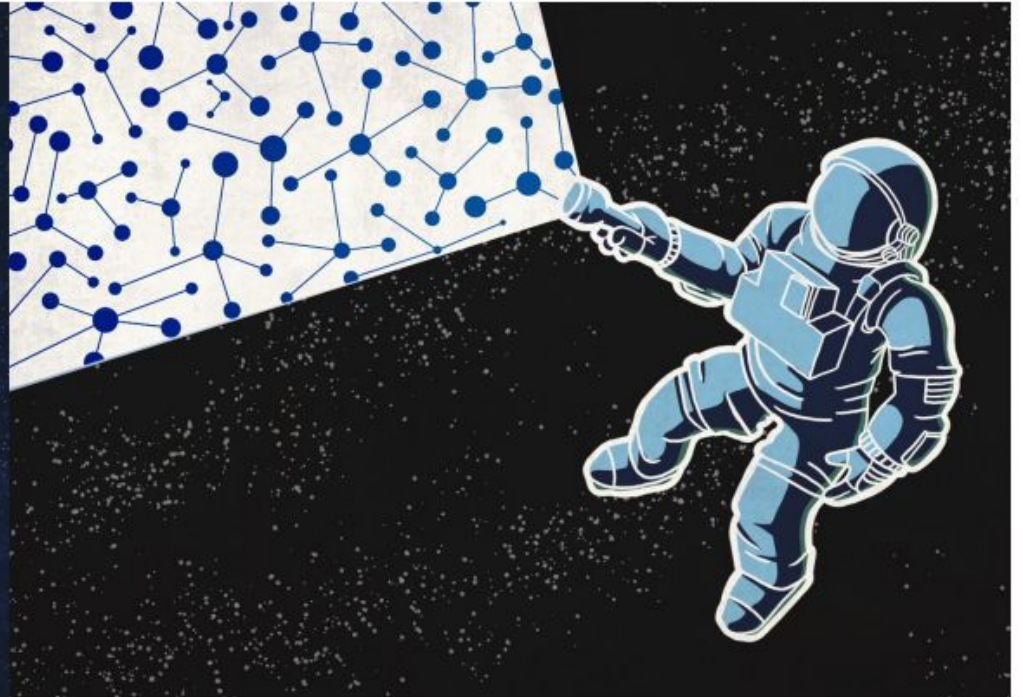
Organización de la clase

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

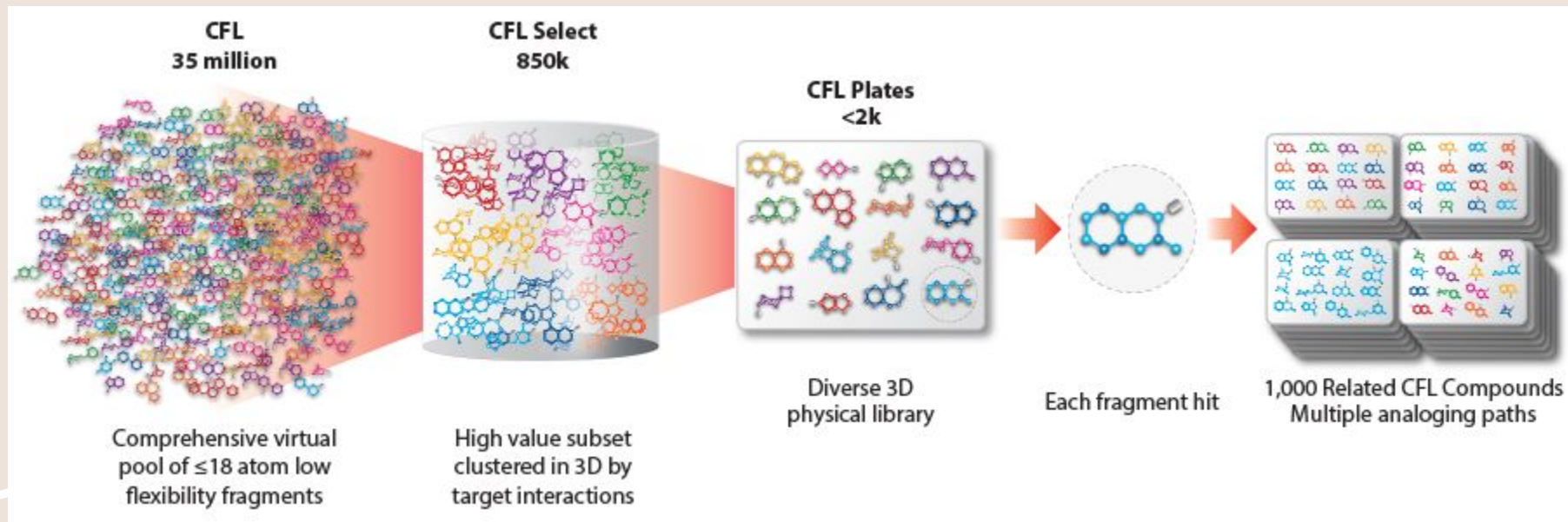
Espacio Químico

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/>

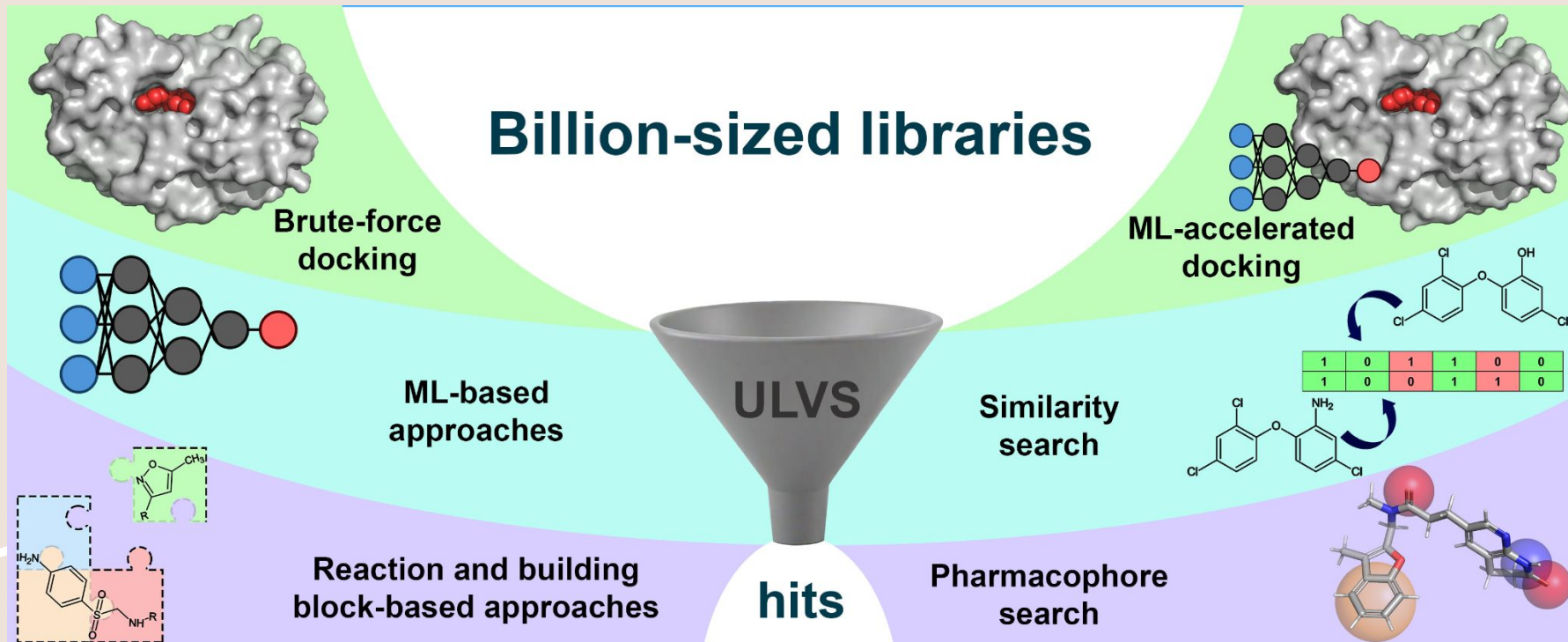


Espacio Químico

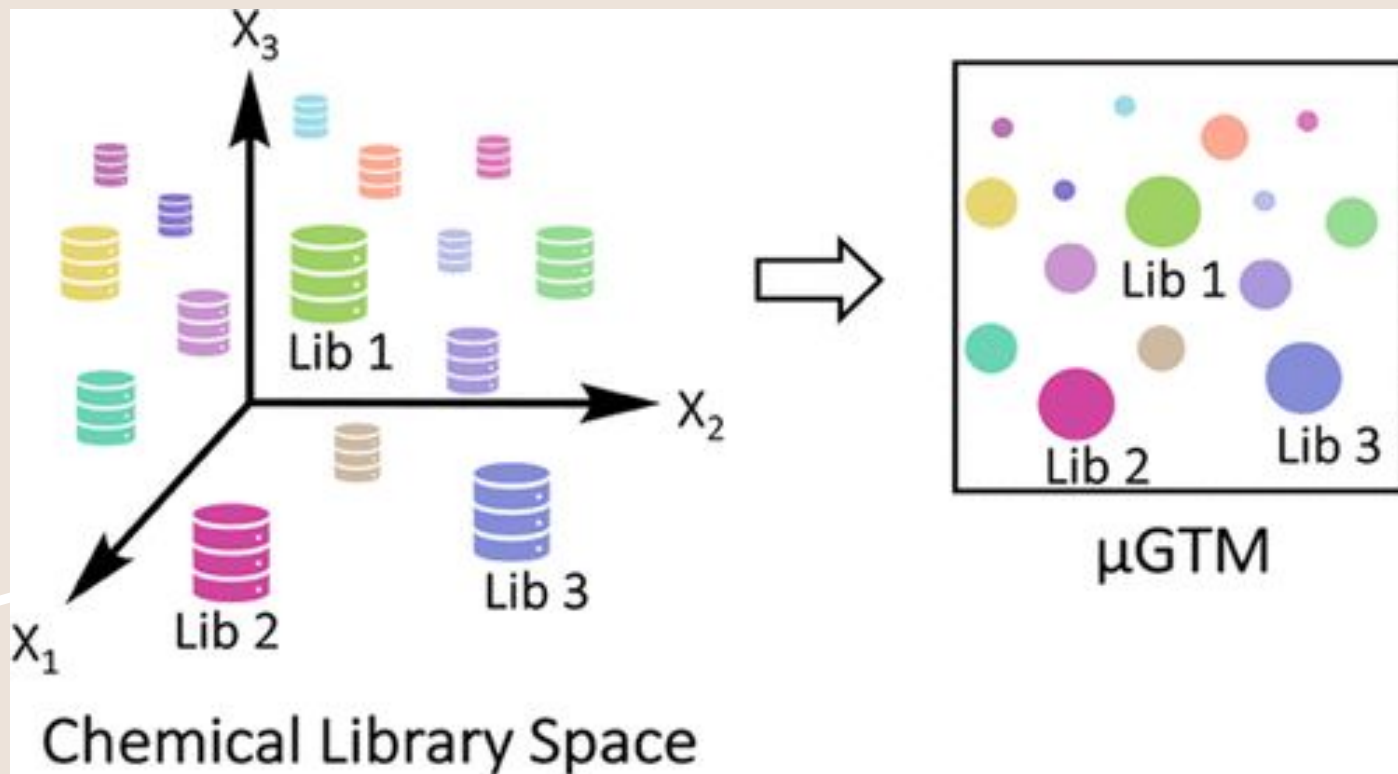


Construcción de librerías químicas

Billion-sized libraries



Construcción de librerías químicas



Base de Datos

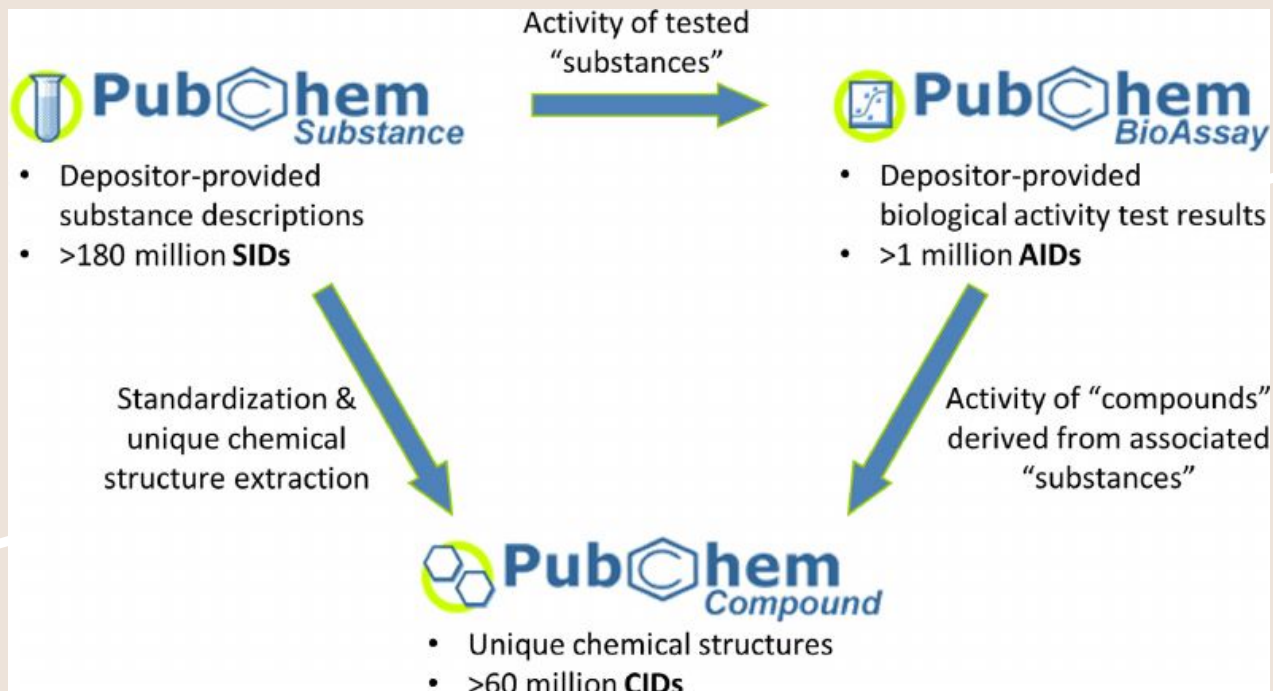
Pub  Chem

Vs

 ChEMBL

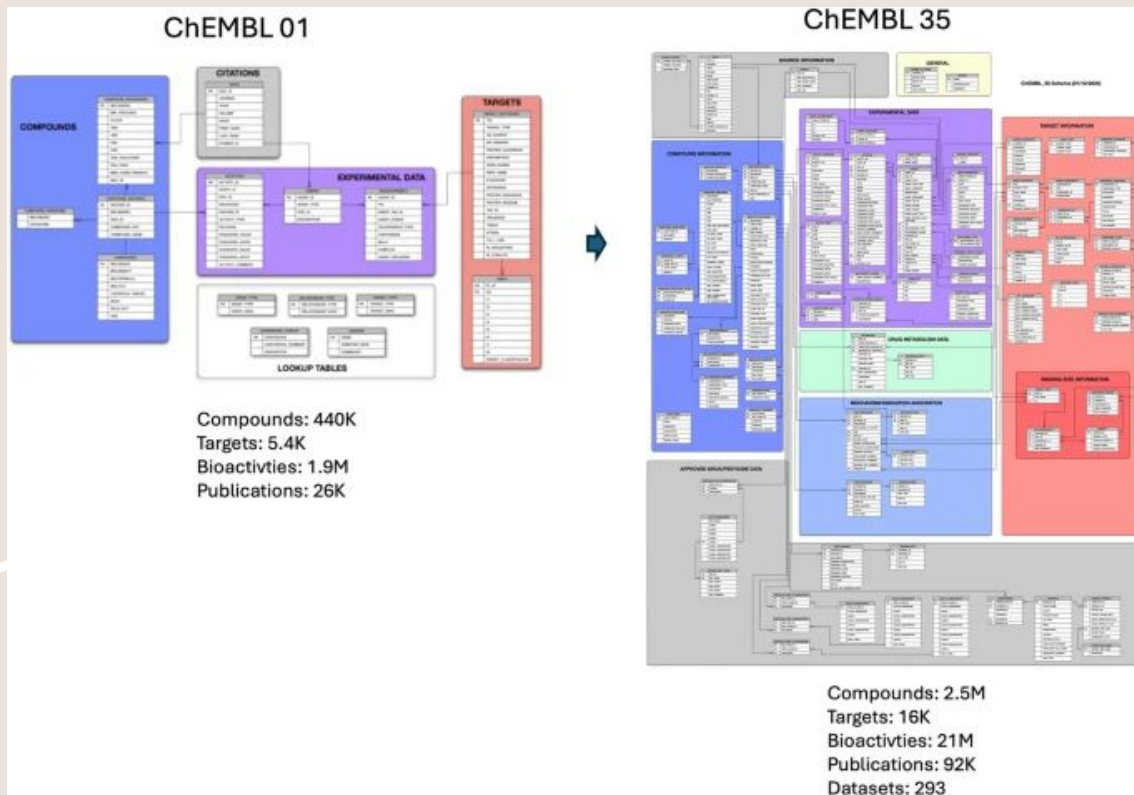
Base de Datos

PubChem

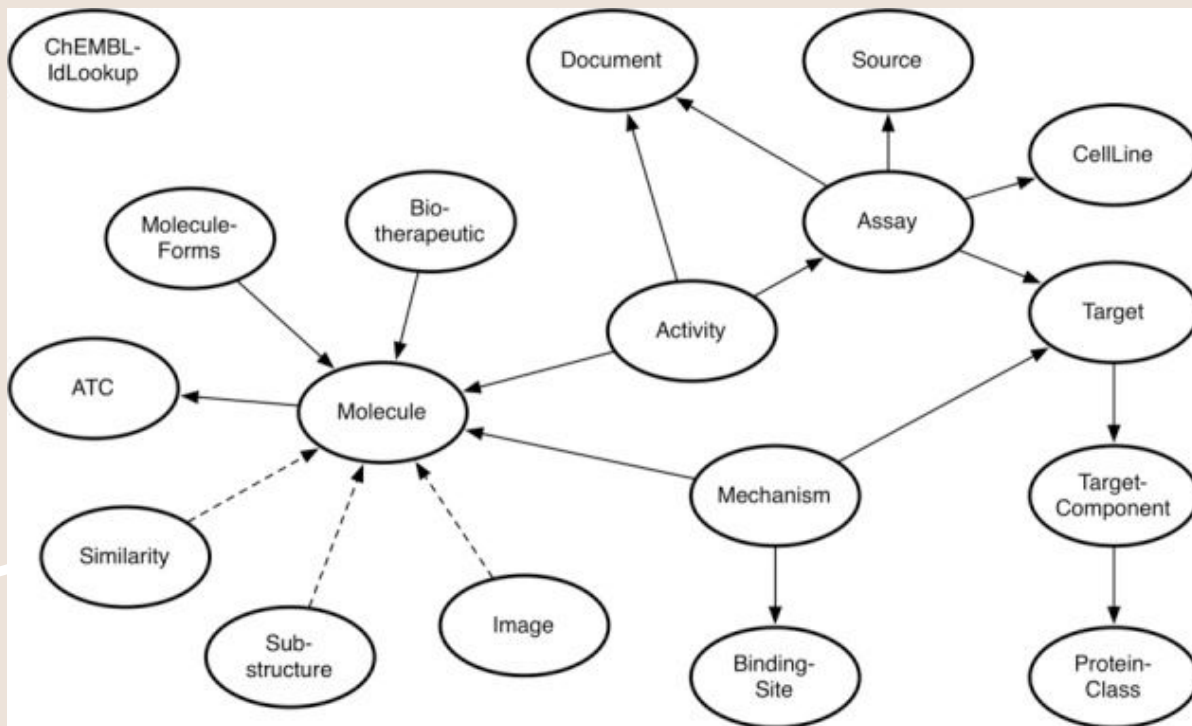


<https://academic.oup.com/nar/article/43/W1/W605/2467896?login=false>

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



pubs.acs.org/acschchemicalbiology


Open Access


This article is licensed under [CC-BY-NC-ND 4.0](#) 

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

 Novartis / GreyChemicalMatter

Search Type / to search

[Code](#) [Issues](#) [Pull requests](#) [Actions](#) [Projects](#) [Security](#) [Insights](#)

 GreyChemicalMatter Public


[Watch](#) 2 [Fork](#) 0 [Star](#) 3

[main](#) [1 Branch](#) [0 Tags](#)

[Add file](#)

[Code](#)

[About](#)

 **Renner, Steffen** refined README 4276375 · 2 years ago 3 Commits

create_gcm	initial commit	2 years ago
gcm_tables	initial commit	2 years ago
.gitignore	Initial commit	2 years ago
LICENSE	Initial commit	2 years ago
README.md	refined README	2 years ago

[Readme](#)
[MIT license](#)
[Activity](#)
[Custom properties](#)

<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
- 