



Screening Virtual: Una Herramienta Eficaz para el Desarrollo de Nuevos Fármacos en Latinoamérica

Alan TALEVI & Luis E. BRUNO-BLANCH*

*Química Medicinal, Departamento de Ciencias Biológicas,
Facultad de Ciencias Exactas, Universidad Nacional de La Plata (UNLP)
Calle 47 y 115 (B1900AVV) – La Plata, Buenos Aires, Argentina.*

RESUMEN. El universo de estructuras químicas teóricas sintéticamente accesibles se calcula actualmente en 10^{100} compuestos. La Química Medicinal y la Industria Farmacéutica internacional en particular, ante la necesidad de aportar nuevos fármacos, han desarrollado herramientas para explorar ese universo virtualmente infinito de compuestos químicos conocidos. Entre esas herramientas encontramos el Screening Virtual (SV), definido como un conjunto de técnicas computacionales orientadas a seleccionar, de entre grandes bases de datos de compuestos químicos, aquellos que presenten mayor probabilidad de poseer una actividad biológica específica al tiempo que reúnen las características estructurales necesarias para exhibir un perfil farmacocinético adecuado. En esta revisión se describirán las distintas técnicas conocidas de SV, con sus ventajas y desventajas asociadas, dando algunos ejemplos de aplicaciones exitosas recientes y discutiendo las posibilidades de la aplicación de esta metodología en América Latina.

SUMMARY. “Virtual Screening: An Efficient Tool for the Development of New Drugs in Latin America”. At present day, the universe of chemical structures synthetically accessible is estimated in 10^{100} compounds. Medicinal Chemistry and international pharmaceutical industry have developed tools to explore, in an efficient manner, that virtually infinite universe of known chemical entities. Among these tools we can find, defined as a set of computational techniques aimed to select, from large databases of chemical compounds, those which present the highest probability of having a specific biological activity and at the same time gather the minimal structural features to exhibit an adequate pharmacokinetic profile. In this review we will describe the different methodologies known as Virtual Screening (VS), with their associated advantages and disadvantages, giving some examples of recent successful applications and discussing the possibilities of the application of this methodology in Latin America.

PALABRAS CLAVE: Docking, Filtros ADME, Screening Virtual, Topología Molecular.
KEY WORDS: ADME filters, Docking, Molecular Topology, Virtual Screening.

* Autor a quien debe dirigirse la correspondencia. *E-mail:* lbb@biol.unlp.edu.ar