

Química computacional para
encontrar nuevos medicamentos
contra agentes infecciosos.

Adrian Jinich
Taller Ciencia para Jóvenes

Mensaje principal del taller:

Tienen que aprender a programar.

Tienen que aprender a programar.

Tienen que aprender a programar.

Tienen que aprender a programar.

Tienen que aprender a programar.

Mensaje principal del taller:
Tienen que aprender a programar.



Por favor:

¡Interrumpan con muchas preguntas!

¡Interrumpan con muchas preguntas!

¡Interrumpan con muchas preguntas!

¡Interrumpan con muchas preguntas!

¡Interrumpan con muchas preguntas!

Por favor:

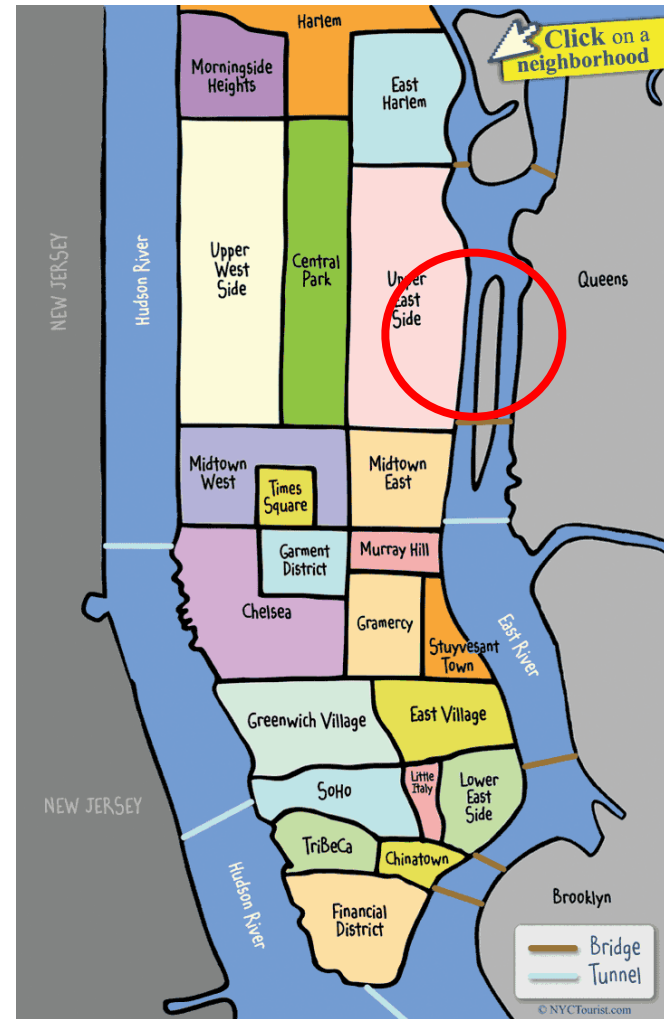
¡Interrumpen con muchas preguntas!

Voy a intentar algo nuevo:

“Ey, estudiante XYZ:
Hazme una pregunta.”



Weill Cornell Medicine

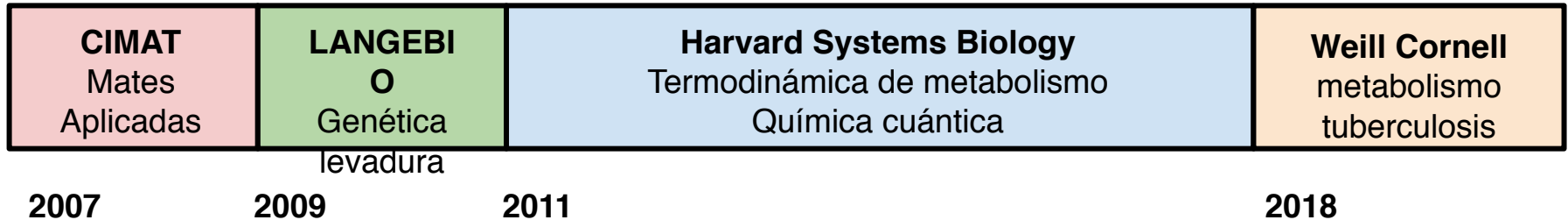


Roosevelt Island, entre Manhattan y Queens



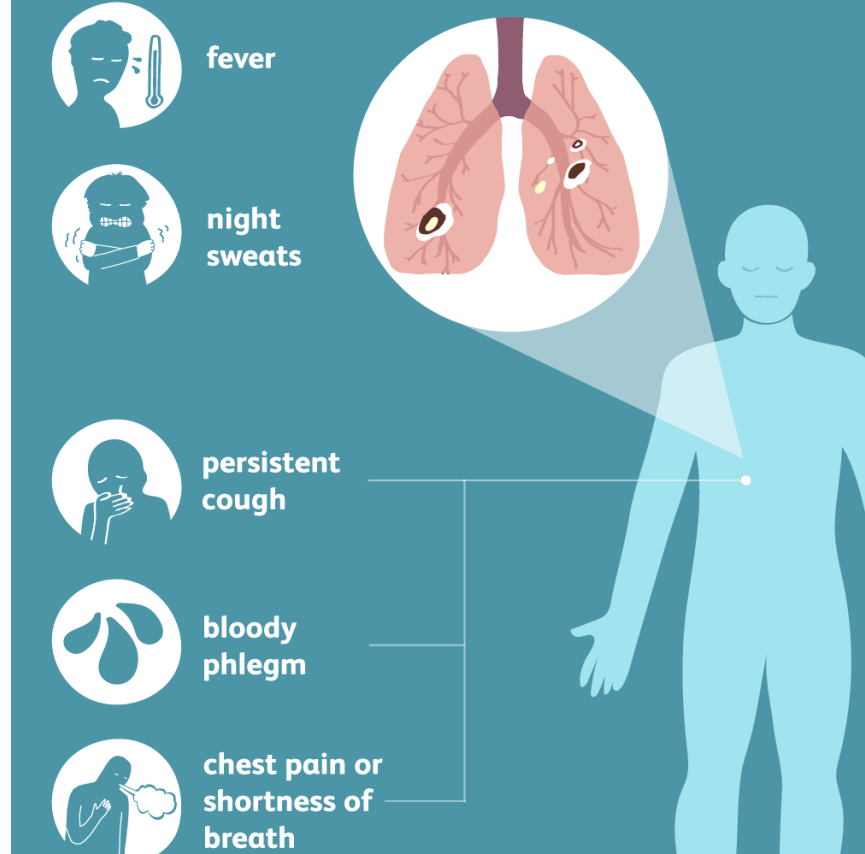
Mi educación científica

Licenciatura en física



Introducción (muy) breve a la Tuberculosis (TB)

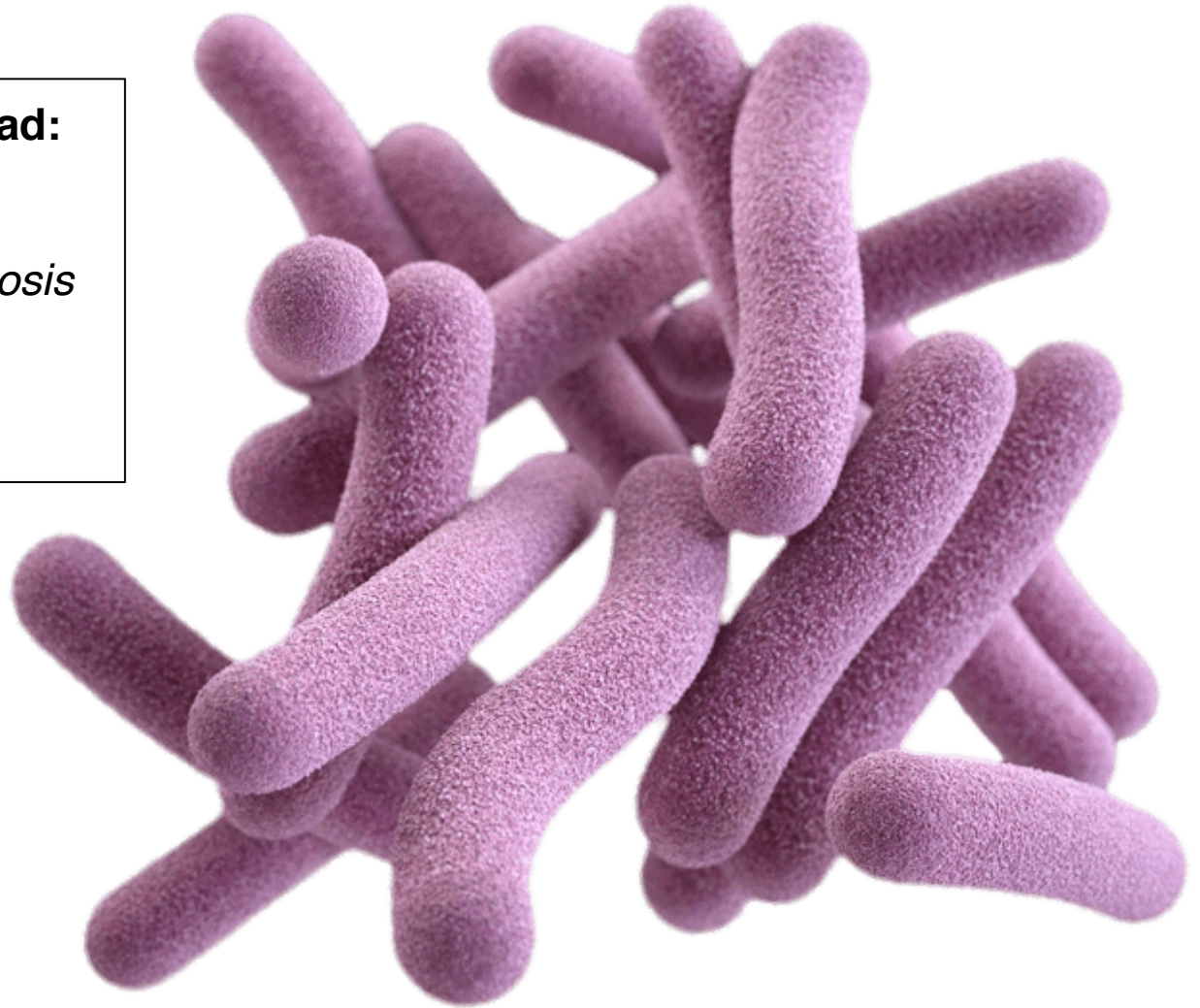
- ❑ Fiebre
- ❑ Sudores nocturnos
- ❑ Tos
- ❑ Flema con sangre
- ❑ Dolor de pecho,
dificultad para respirar
- ❑ Pérdida de peso



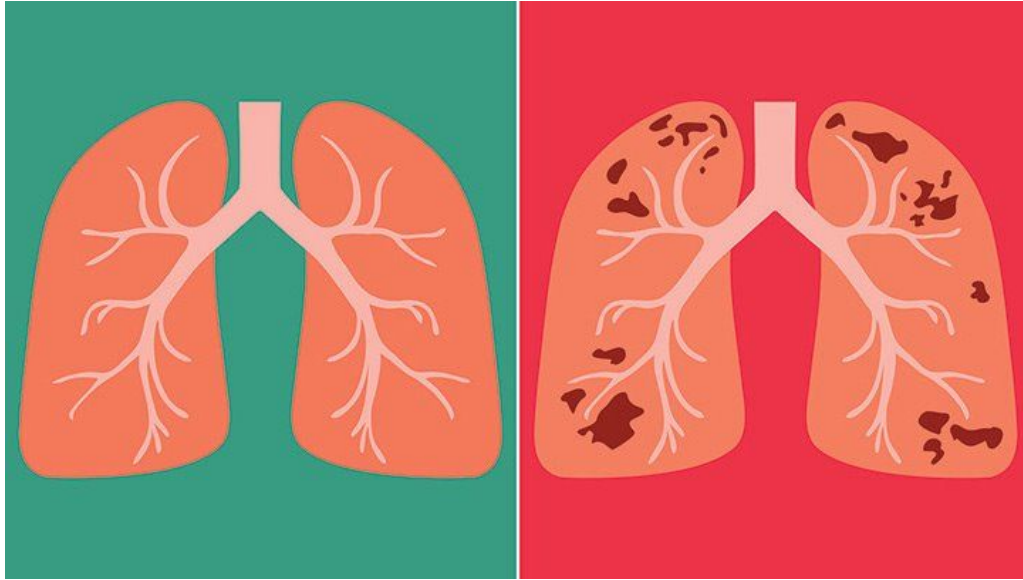
Causa de la enfermedad:

Bacteria
Mycobacterium tuberculosis
(*Mtb*)

~ 4,000 genes



Introducción (muy) breve a la Tuberculosis (TB)



Tuberculosis pulmonar



Enfermedad de Pott

Introducción breve a la Tuberculosis (TB)

Video corto (TED Education)

<https://youtu.be/N0Gv96uDctM>

Gente famosa (aleatoria) que murió por tuberculosis

Simón Bolívar: fundador de las repúblicas de la Gran Colombia y Bolivia.

Franz Kafka (escritor)

Frédéric Chopin (compositor)

Anne Darwin (la hija mayor de Charles Darwin)

Niels Henrik Abel (Matemático)

William Kingdon Clifford (Matemático)

Bernhard Riemann (Matemático)

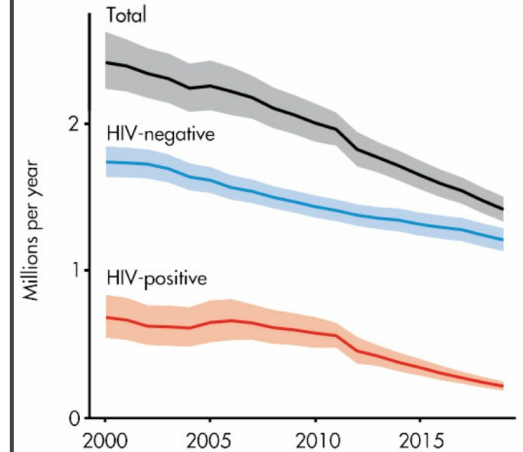
Pero toda esa gente vivió hace mucho. **Es una enfermedad del pasado, ¿no?**

Tuberculosis (TB) es un gran problema a escala global

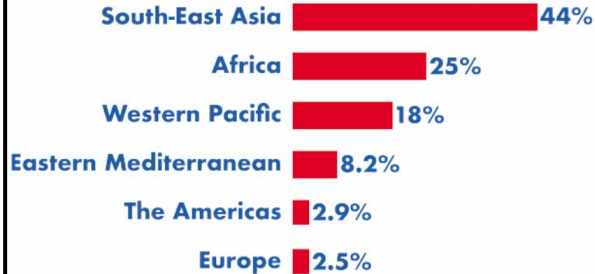
10 MILLION PEOPLE
FELL ILL WITH TB
IN 2019*

#1 CAUSE OF DEATH
FROM A SINGLE
INFECTIOUS AGENT

GLOBAL TRENDS IN THE ESTIMATED NUMBER OF TB DEATHS



REGIONAL DISTRIBUTION OF PEOPLE WHO DEVELOPED TB IN 2019

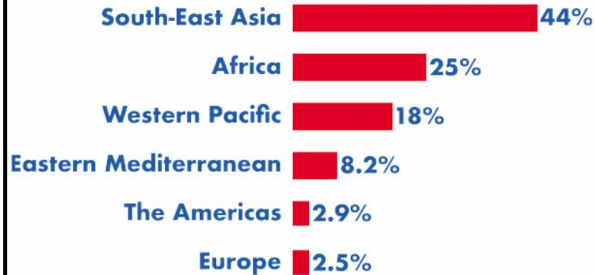


WHO Global TB Report
(2020)

10 MILLION PEOPLE
FELL ILL WITH TB
IN 2019*

#1 CAUSE OF DEATH
FROM A SINGLE
INFECTIOUS AGENT

REGIONAL DISTRIBUTION OF PEOPLE WHO DEVELOPED TB IN 2019



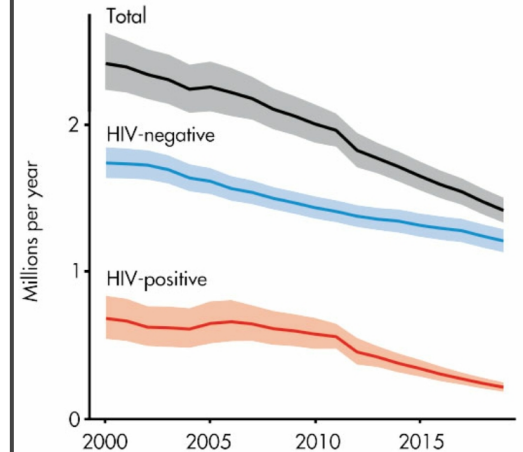
Combinación de antibióticos

- 4 medicamentos
- ~6 meses

OMS “End TB Strategy”

- Diagnostics
- Vaccines
- Drugs
- Basic science research**

GLOBAL TRENDS IN THE ESTIMATED NUMBER OF TB DEATHS



WHO Global TB Report
(2020)

Introducción breve a la Tuberculosis (TB)

Our World in Data

<https://ourworldindata.org/vaccine-preventable-diseases>

<https://ourworldindata.org/grapher/tuberculosis-death-rates>

Ejercicios sencillos.

- Tasa de muertes por TB en México → ¿cuántos muertos en total por año?
- País con mayor número total de muertes por TB
- Tendencia en los últimos años → ¿va mejorando o va empeorando la cosa?

The logo for 'Our World in Data' is displayed on a dark blue background. The text 'Our World in Data' is written in a large, yellow, serif font. Below it, the tagline 'Research and data to make progress against the world's largest problems' is written in a smaller, yellow, serif font. The background of the logo features a faint, light blue world map.

Our World in Data

Research and data to make progress
against the world's largest problems

Introducción breve a la Tuberculosis (TB)

Existe una vacuna, pero....

The vaccine for TB – Bacillus Calmette–Guérin (BCG) – has been in use for nearly 100 years. It protects against severe forms of TB but is not effective against pulmonary TB (in the lungs) and has variable effectiveness against TB in adults

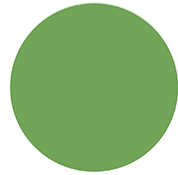
Introducción breve a la Tuberculosis (TB)

Existen medicamentos (antibióticos), pero...

- ❑ 4 antibióticos que hay que tomar por [ADIVINEN....]
- ❑ Si tienes mala suerte, te infecta una cepa de la bacteria resistente a antibióticos.
 - ❑ The estimated number of people in 2016 with multi-drug resistant TB was 490,000.
 - ❑ [ADIVINEN hasta cuánto tiempo...]

Introducción breve a la Tuberculosis (TB)

Tuberculosis latente: el enemigo está dormidito....



Clear



Latent TB



Active TB



Mensaje principal del taller:

Tienen que aprender a programar.

Tienen que aprender a programar.

Tienen que aprender a programar.

Tienen que aprender a programar.

Tienen que aprender a programar.