|  |  |
| --- | --- |
| ***Семинар «Научные базы данных Pathway Studio, Reaxys и Reaxys Medicinal Chemistry для решения задач генетики, системной биологии, аннотации данных NGS и данных на чипах, разработки и перепрофилирования фарм препаратов, медицинской химии, биоинформатики и персонализированной медицины, разработки новых соединений и материалов с заданными свойствами»*** | |
|  | **Pathway Studio** - крупнейшая в мире база данных молекулярно-биологических объектов (МБО, белки, клетки, микроРНК и др.) и взаимодействий между МБО. Исследование метаболических путей и анализ их изменений в состоянии заболевания, поиска мишеней и биомаркеров, анализ омиксных экспериментальных данных и данных секвенирования.  В ходе семинара будут рассмотрены следующие примеры применения Pathway Studio:   1. Какие молекулы, действующие на mTOR и IGF-1, исследованы клинически против рака? 2. Какие сигнальные пути связаны с дофаминовыми рецепторами? 3. Как белки, секретируемые из карциномы молочной железы, влияют на клетки, участвующие в ее механизме? 4. Аннотация данных полногеномного секвенирования NGS. Анализ данных на чипах. Как можно предсказать долгое выживание при астроцитоме? |
|  | **Reaxys Medicinal Chemistry**база данных структурного поиска по медицинской химии. Она предназначена для установления связей между химическими соединениями, мишенями и биологической активностью, что позволяет оценивать потенциальные лекарственные препараты на ранней стадии. База данных содержит информацию по доклиническим исследованиям, токсичности, фармакокинетике и многому другому.  В ходе семинара будут рассмотрены следующие примеры применения базы:   1. Прогнозирование ADMET свойств, влияющих на разработку фармацевтических препаратов: ингибирование Herg-канала. 2. Сравнение метаболической стабильности азетидинов и пирролидинов. 3. Разработка новых и перепрофилирование существующих препаратов от шизофрении: поиск всех релевантных мишеней, профиля биологической активности существующих препаратов, поиск препаратов с аналогичным профилем, но не исследованных от шизофрении. |
|  | **Reaxys** — база данных химических реакций, соединений и их свойств, структурированная в соответствии с химическими принципами и обладающая уникальными характеристиками, которые обеспечивают большую гибкость в формировании запросов, разработке путей синтеза химических соединений, создании отчетов, детальных обзоров литературы и других потребностей пользователя. Широкие возможности экспорта химических данных делают Reaxys обширным источником для построения компьютерных моделей. |