

ХУДОШИН А Г

Elsevier B.V., Амстердам, Нидерланды

ПРИМЕНЕНИЕ БАЗ ДАННЫХ REAXYS MEDICINAL CHEMISTRY И PATHWAY STUDIO ПРИ ИССЛЕДОВАНИИ МИШЕНЕЙ ДЛЯ ЛЕКАРСТВ НА ПРИМЕРЕ ШИЗОФРЕНИИ

Цель: показать возможность применения баз данных Reaxys Medicinal Chemistry и Pathway Studio для решения задач компьютерного конструирования лекарств

Материалы и методы: в работе исследованы мишени для лекарств от шизофрении с помощью баз данных Reaxys Medicinal Chemistry и Pathway Studio

Результаты: Показаны подходы использования базы данных Pathway Studio и Reaxys Medicinal Chemistry для исследования мишеней для лекарств от шизофрении. Показано, как с помощью Pathway Studio определить общеизвестные мишени для лекарств от шизофрении, а также проверить предлагаются ли инновационные разработки в литературе, выявить известные препараты, действующие на определенные регуляторы, а также определить какие мишени отвечают за когнитивные функции человека. В докладе представлены примеры использования подхода на основе управления данными по взаимосвязи структуры и активности молекул к решению задач разработки фарм препаратов. С помощью Reaxys Medicinal Chemistry построен типовой профиль действия препаратов для лечения шизофрении, что позволяет рассмотреть возможность перепрофилирования других препаратов и химических молекул. Использование базы данных Reaxys Medicinal Chemistry позволяет быстро решить такие задачи как поиск структур антагонистов 5-HT_{2a} с низким сродством к herg каналу, поиск информации по метаболизму определенного фенотипа и многие другие. На примере дигалогенидов фенолов показаны возможности исследование влияния структурных особенностей на биологическую активность соединений.

Выводы: рекомендовать применения баз данных Reaxys Medicinal Chemistry и Pathway Studio для компьютерного моделирования лекарств