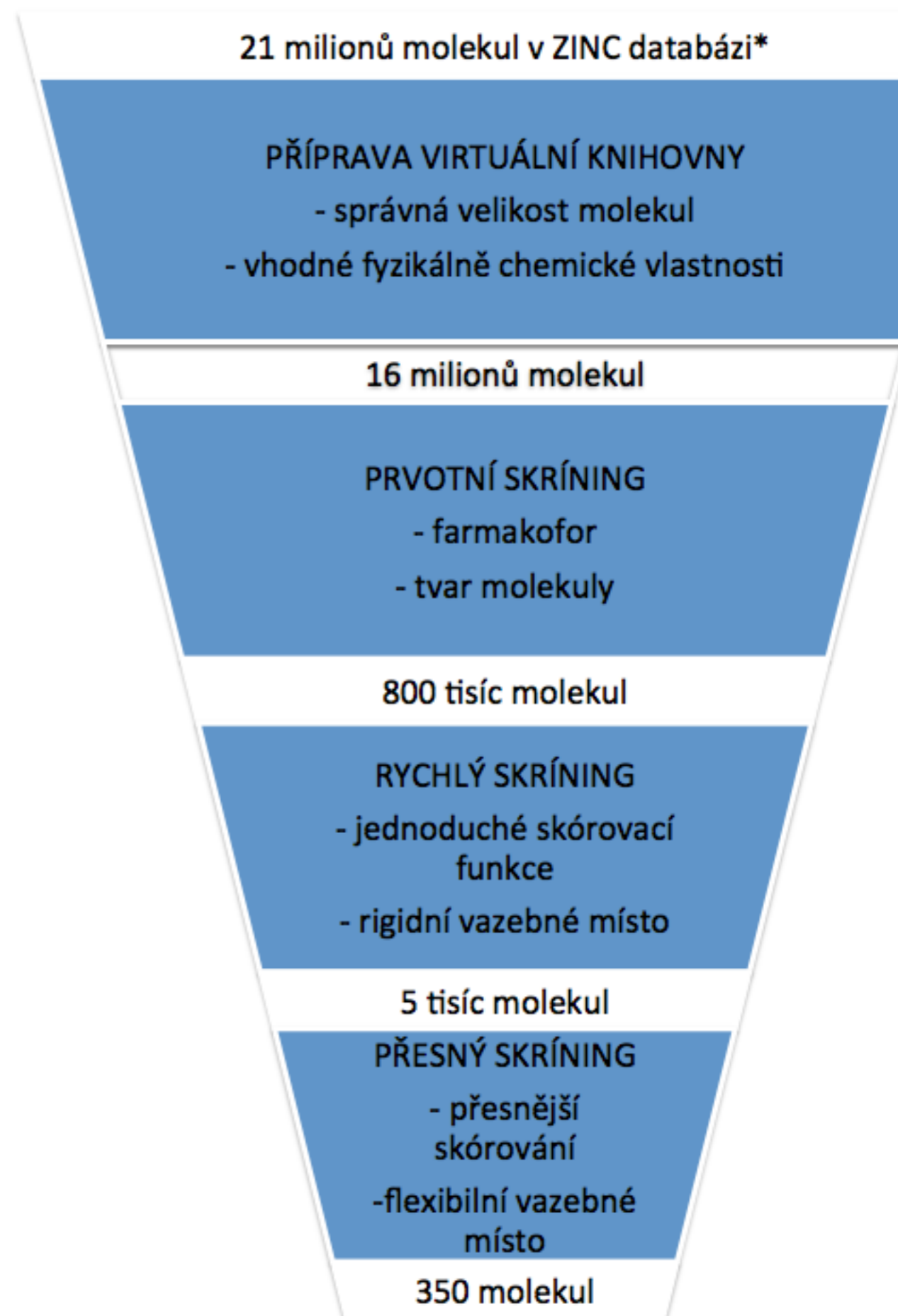


Pokročilá chemoinformatika

Úvodní přednáška
únor 2015

Harmonogram

- Pondělí
- 9.00 - 9.20 Úvodní přednáška
- 9.20 - 10.30 Základní znalosti
- 10.30 - 10.40 *Přestávka*
- 10.40 - 11.20 Jak zatočit s bolestí
- **11.20 - 13.00 Molekulové dokování**
- 13.00 - 14.00 *Oběd*
- 14.00 - 14.30 *Prohlídka*



Chemoinformatika

- “The use information technology and management has become a critical part of the drug discovery process. Chemoinformatics is the mixing of those information resources to transform data into information and information into knowledge for the intended purpose of making better decisions faster in the area of drug lead identification and organisation.”

K. Brown, *Annual Reports in Medicinal Chemistry* 1998

- “Chemoinformatics - A new name for an old problem.”
M. Hann, R. Green, *Current Opinion in Chemical Biology* 1999
- “The application of informatics methods to solve chemical problems.”
Chemoinformatics: Johann Gasteiger, Thomas Engel (Eds.) 2003

Definice chemoinformatiky:

“Využití infromatických metod na řešení chemického problému.”

-Johann Gasteiger

Co může být chemický problém?

- výpočet koncentrace roztoku, molekulové hmotnosti, vyčíslení rovnice reakce, ..., obrázek nebo vzorec látky
- chceme látku s určitou vlastností nebo aktivitou



- máme vymyšlenou strukturu, jak ji vyrobit?



- jak reakce dopadne nebo jak se stane s látkou v prostředí?

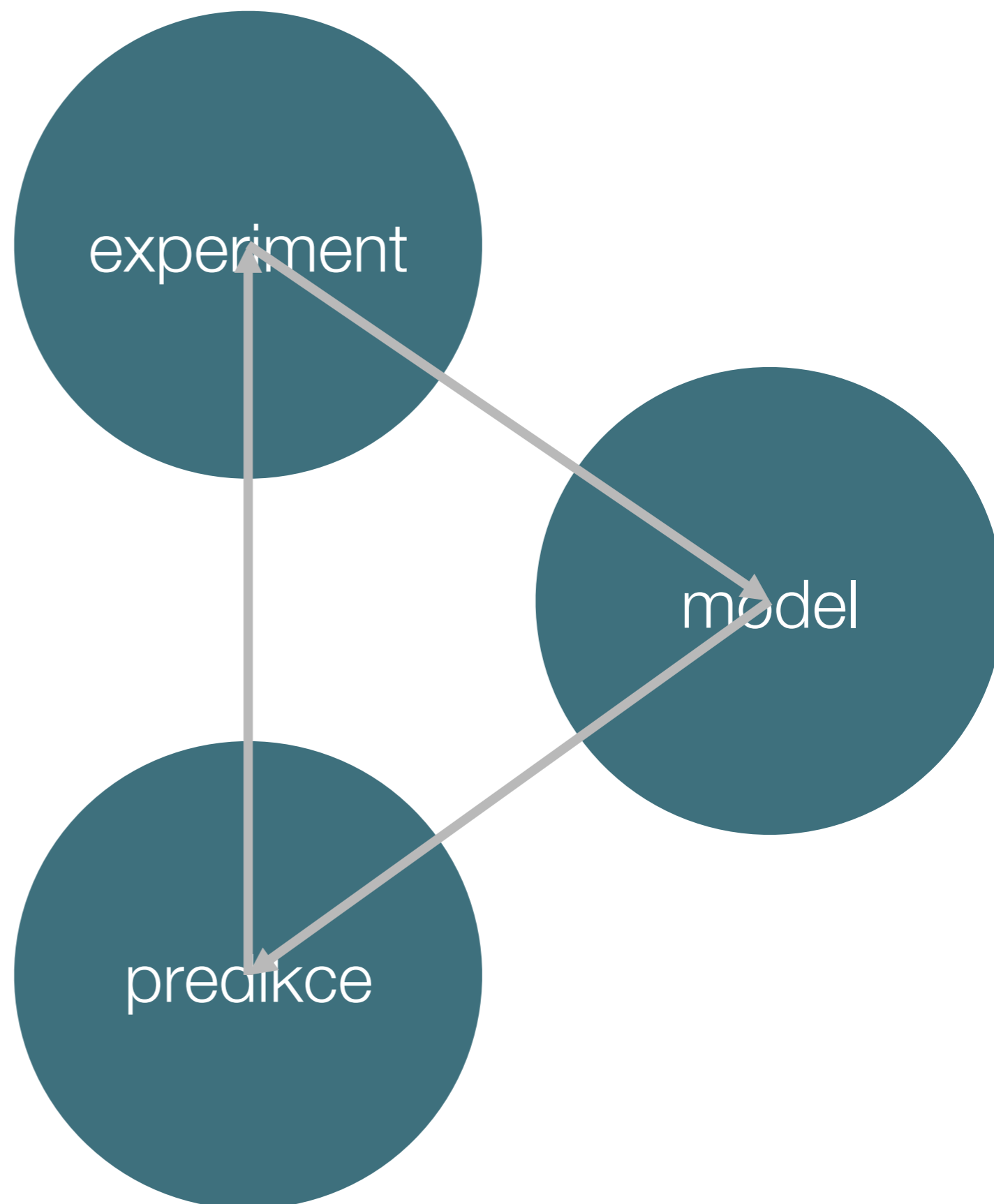


Jak to funguje?

- učení logickou indukcí

vs.

- učení dedukcí



Hot topics

- Drug design
 - Virtuální screening
 - Molekulové dokování
- Reprezentace a vizualizace chemického prostoru
- Databáze a nástroje

Drug design

OBJEVOVÁNÍ
CÍLE
TARGET
DISCOVERY

IDENTIFIKACE NEMOCI



VÝZKUM METABOLICKÝCH DRAH



VÝBĚR CÍLOVÉHO PROTEINU



3D STRUKTURA



OBJEVOVÁNÍ
ÚČINNÉ LÁTKY
DRUG
DISCOVERY

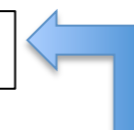


VIRTUÁLNÍ SKRÍNING



VIRTUÁLNÍ KNIHOVNA
MOLEKUL

SKRÍNING



HTS



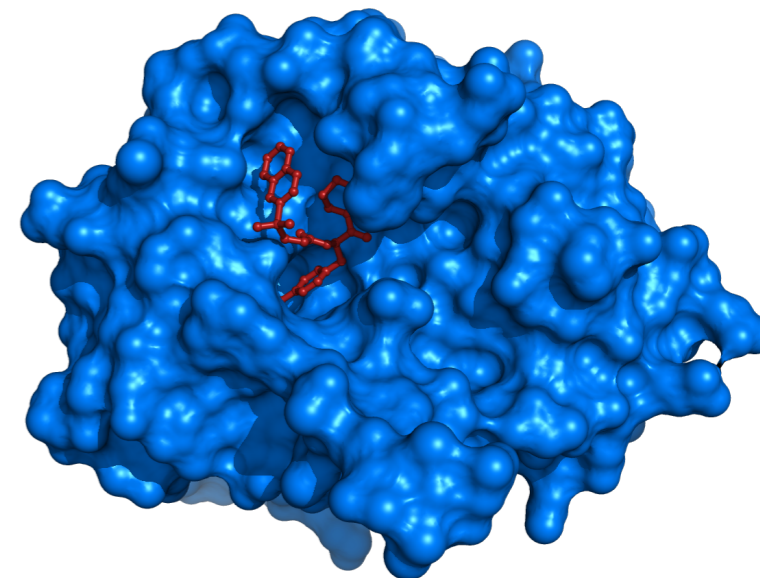
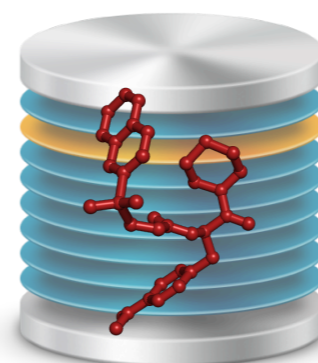
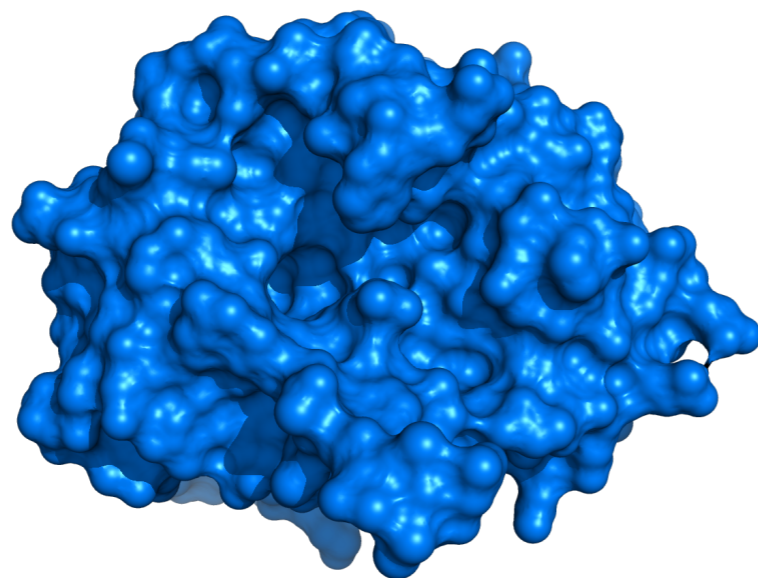
KNIHOVNA
SYNTETIZOVANÝCH LÁTEK



"LEADS"

LÁTKY VYKAZUJÍCÍ AKTIVITU

Co potřebujeme znát?



Nemoc

Protein + databáze molekul

“Leads”

hledání
biochemických
drah

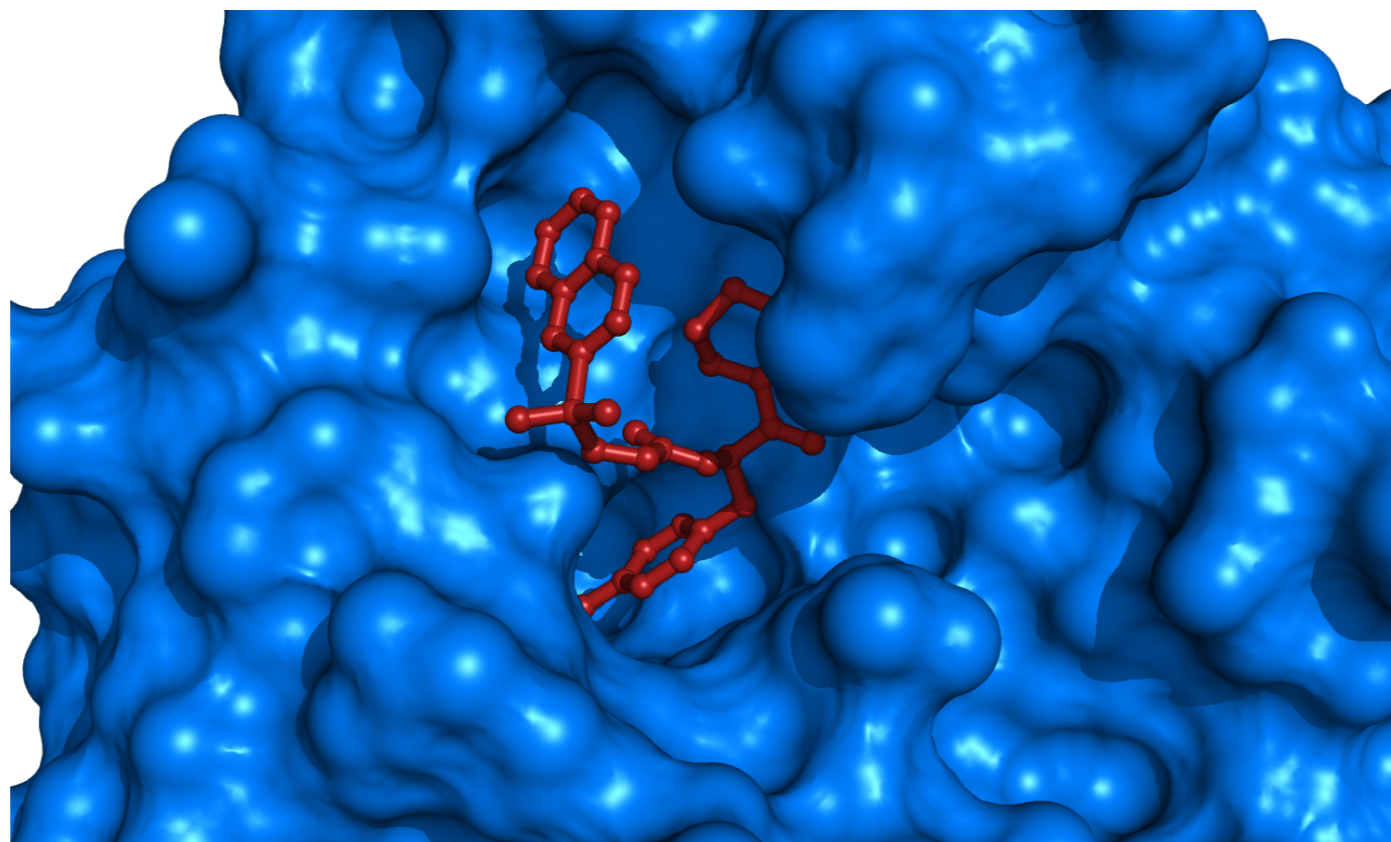


skríníng



organická molekula

protein



léčivo

gen

Chemoinformatika

- malé molekuly
- “zrychlení”, zefektivění a zlevnění výzkumu a vývoje nových léčiv
- primárně ve farmaceutickém průmyslu

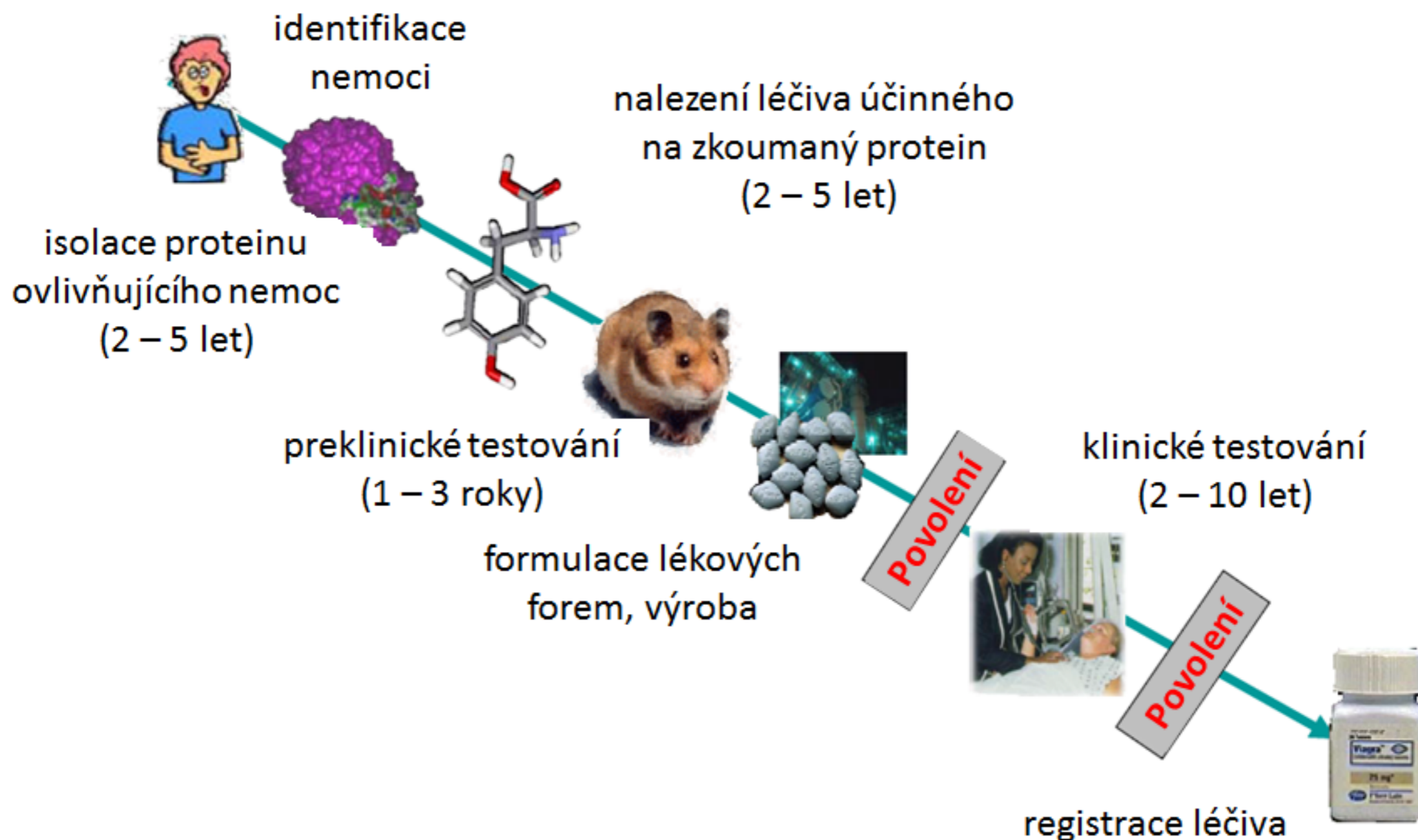
Bioinformatika

- velké biomolekuly, sekvence
- potřeba zpracování obrovského množství dat ze sekvenátorů
- primárně ve výzkumu

Farmaceutický výzkum

- Kolik stojí uvedení jednoho léku na trh?
- Jak dlouho to trvá?
- Kolik máme fází klinického testování?
- Jak farmaceutické firmy chrání svoje léky a jak dlouho je mohou takto chránit?
- Co jsou to generická léčiva?

Farmaceutický výzkum



Úkol

1. Vyhledejte nějaký software pro chemoinformatické účely.
2. Vyhledejte licenci, popřípadě cenu tohoto softwaru.
3. Vyberte jednu z následujících nemocí a zkuste dohledat potenciální léčiva, cílové proteiny a mechanismy účinků.
 - a) bolest
 - b) Alzheimerova nemoc