

# Руководство по входу и началу работы с базами Pathway Studio и Reaxys Medicinal Chemistry

# СОДЕРЖАНИЕ

1. Что такое Pathway Studio?
2. Что такое Reaxys Medicinal Chemistry?
3. Как войти в Pathway Studio и Reaxys Medicinal Chemistry?
4. Где найти оригинальные учебные материалы (на английском языке)?

# Что такое Pathway Studio?

## База знаний

Крупнейшая в мире база биологических взаимосвязей, извлеченных из литературы

Онтологии

Уникальная коллекция вручную курированных сигнальных путей

## Инструменты

Для поиска, обобщения, навигации и визуализации литературы

Для анализа экспериментальных данных:  
Экспрессия генов  
ОМИКСные данные  
Мутации

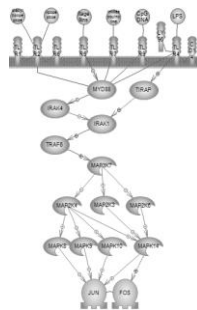
>24МЛН рефератов  
>3.5МЛН полных текстов



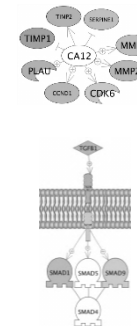
>7.4МЛН взаимосвязей



Pathway Studio  
ontology  
Gene Ontology



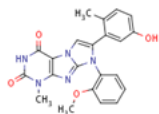
Name	Coordinates	Expression	Phenotype	Age
CCNE	5,255	4,85e-05	0.009	0.01
FABP2	9,939	4.17e-05	0.009	0.01
FABP5	1,294	4.18e-05	0.009	0.04
FBXW7	5,507	4.23e-05	0.01	0.05
MAP2K1	5,376	4.84e-05	0.001	0.03
MAP2K2	5,369	4.85e-05	0.004	0.03
PPP2R1	23,047	4.86e-05	0.0001	0.01
CSDE1	9,919	1.14e-05	0.001	0.01
CSDE2	5,009	5.06e-05	0.001	0.01
ERS1	12,008	5.23e-05	0.004	0.04
COL1	24,046	1.29e-05	0.009	0.01
TRAF3	2,810	9.83e-05	0.001	0.02
SLIT1	9,164	5.01e-05	0.009	0.01
MAP3K1	9,232	7.11e-05	0.001	0.01
MAP3K2	9,243	1.67e-05	0.009	0.01
MAP3K3	9,255	3.96e-05	0.009	0.01
MAP3K4	9,267	6.67e-05	0.009	0.04



- >2000 вручную курированных сигнальных путей:
  - Биологические функции
    - Заболевания
  - Внутриклеточная сигнализация

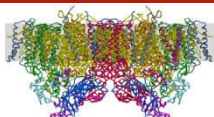
# ЧТО ТАКОЕ REAXYS MEDICINAL CHEMISTRY?

## Химические соединения



Химические структуры, названия, коды, синонимы соединений, вычисленные физикохимические свойства (log P, HBA, HBD, PSA, RotB), правило Липински

## Мишени для лекарств



Исследование профиля биологической активности и аффинности к мишеням химических соединений

## In vitro and Cell Based assays



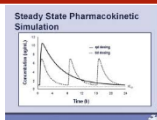
In vitro assays (binding, second messenger etc..) and Cell based assays for example : Aggregation, Angiogenesis, Apoptosis, Cell differentiation, Cellular Cycle

## Модельные заболевания животных



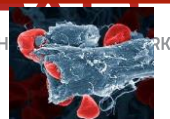
Zucker rats for obesity model, ovariectomized rat in osteoporosis, treatment of glaucoma, Xenografted animals with tumors to test antineoplastic drugs

## Фармакокинетика и свойства ADME



Метаболическая стабильность, собственный клиренс, период полупревращения, биодоступность, In vivo Clearance

## Токсичность



Цитотоксичность, кардиотоксичность, хроническая токсичность

# База Reaxys Medicinal Chemistry содержит

## Международные патенты

>101 000 патентов

- US : 1971 - н.в.
- EP : 1979 - н.в.
- WO : 1978- н.в. (English only)
- Исследуются патенты в основном класса А61К, но не только они.

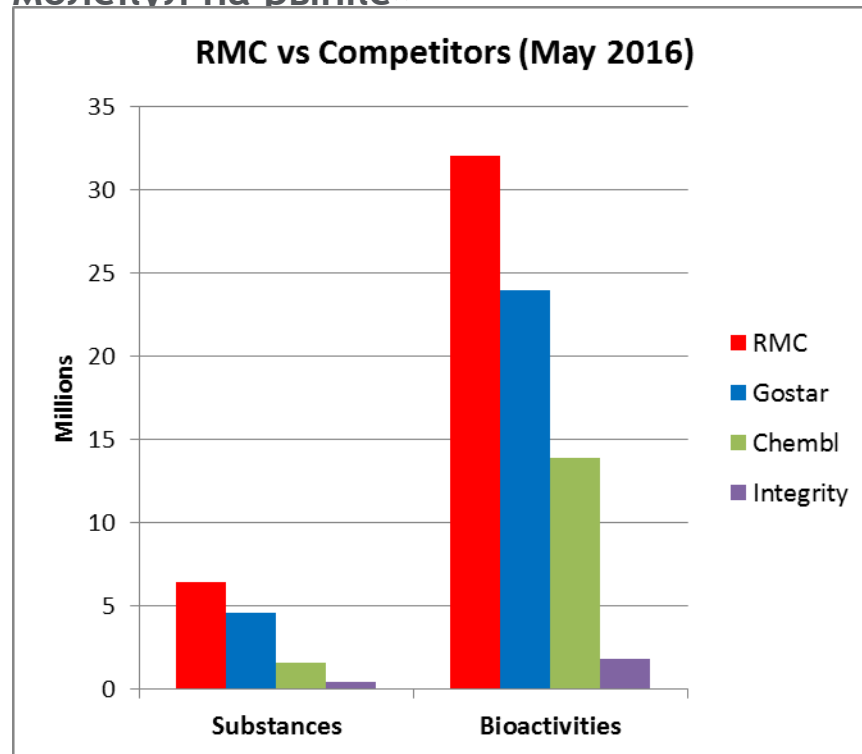
## Статьи и журналы

- >5000 покрыто журналов
- >335 500 статей
- Начиная с 1980 по н.в.

## Мишени

- >12 700 Мишеней

«Полная и структурированная база данных по медицинской химии малых молекул на рынке»



“Те, кто не помнят прошлое, обречены повторять его.”

George Santayana: *Life of Reason, Reason in Common Sense*, Scribner's, 1905, page 284

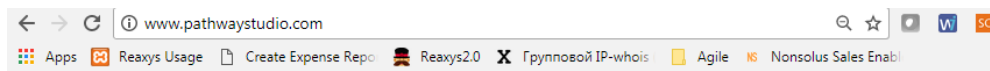
# КАК ВОЙТИ В PATHWAY STUDIO? ПОЧЕМУ НЕОБХОДИМА РЕГИСТРАЦИЯ?



Для работы в Pathway Studio необходимо наличия личного кабинета с Вашими личными папками и данными.

На следующих слайдах показано, как зарегистрировать нового пользователя Pathway Studio. Данная инструкция применима только для формата доступа по IP-адресу.

# НАЧАЛЬНАЯ СТРАНИЦА PATHWAY STUDIO



## Pathway Studio

Pathway Studio enables analysis and visualization of disease mechanisms, gene expression and proteomics and metabolomics data. It is an exhaustive resource of easily searchable data from biology articles describing interactions between molecules, cell processes, and diseases. It also helps biological researchers import and analyze their experimental data using statistical tools. Browsing its expertly curated signaling pathway collection lets researchers put to use network and pathways analysis for modeling the impact of differential gene or protein expression and protein-protein interactions on disease, streamlining the involved biological process in drug target discovery. Viewing free interactive signaling pathway samples from curated database outlines major trends in biological research of signal transduction pathways.

Please select one of the following options:

Pathway Studio MammalPlus

Pathway Studio Mammal

Pathway Studio Plant

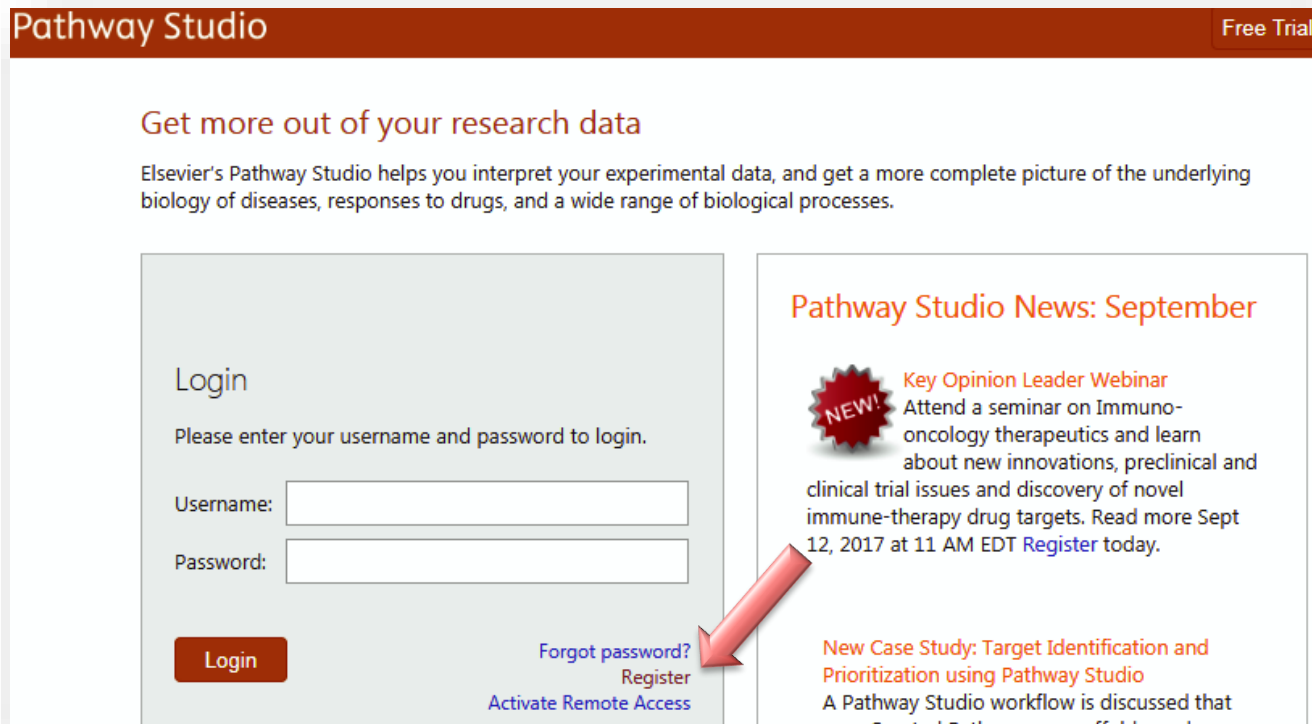


Откройте страницу <http://www.pathwaystudio.com>

И выберите необходимый вариант доступа, как показано на данном слайде.

Совет: **Pathway Studio MammalPlus** обычно лучший выбор, если только Вы не работаете с растениями.

# РЕГИСТРАЦИЯ В PATHWAY STUDIO



The screenshot shows the Pathway Studio website interface. At the top left, it says 'Pathway Studio' and at the top right, 'Free Trial'. Below the header, there is a section titled 'Get more out of your research data' with a subtext: 'Elsevier's Pathway Studio helps you interpret your experimental data, and get a more complete picture of the underlying biology of diseases, responses to drugs, and a wide range of biological processes.'

On the left side, there is a 'Login' section with the text 'Please enter your username and password to login.' Below this are two input fields: 'Username:' and 'Password:'. A red arrow points to the 'Register' link located below the 'Forgot password?' link.

On the right side, there is a section titled 'Pathway Studio News: September'. It features a 'NEW!' badge and a 'Key Opinion Leader Webinar' announcement: 'Attend a seminar on Immunology therapeutics and learn about new innovations, preclinical and clinical trial issues and discovery of novel immune-therapy drug targets. Read more Sept 12, 2017 at 11 AM EDT Register today.' Below this is another announcement: 'New Case Study: Target Identification and Prioritization using Pathway Studio' with a subtext: 'A Pathway Studio workflow is discussed that uses Curated Pathways as scaffolds, and...'

При наличии доступа по IP-адресу Вы должны увидеть картинку выше.

При наличии попробуйте пойти в Pathway Studio с использованием существующей пары логин-пароль для других продуктов Elsevier (ScienceDirect, Scopus, Reaxys, Embase, Clinical Key и др.). Если данный логин отсутствует или не работает, Вы можете зарегистрировать новый. Для регистрации нового логина нажмите **Register**.

Совет: данная страница также доступна по ссылке <https://mammalcedfx.pathwaystudio.com>



# РЕГИСТРАЦИЯ В PATHWAY STUDIO

Register

Salutation:

First Name: \*

Last Name: \*

E-mail: \*

Phone Number:

Job title:

I wish to receive information from Elsevier B.V. and its affiliates concerning their products and services

Organization Name:

Organization Type:

User Role: \*

Password: \*

Confirm password: \*

Please select at least one subject area of interest \*

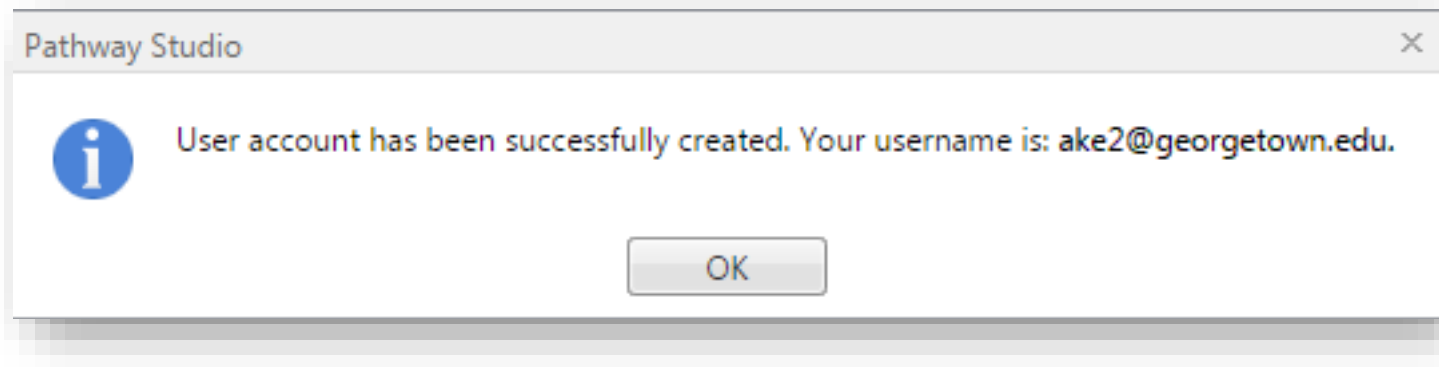
- Agricultural and Biological Sciences
- Arts and Humanities
- Biochemistry, Genetics and Molecular Biology
- Business, Management and Accounting
- Chemical Engineering

I have read and understand the [Registered User Agreement](#) and agree to be bound by its terms \*

[Terms and Conditions](#) | [Privacy Policy](#)

Заполните все необходимые поля на странице регистрации, прославьте галочку о прочтении и согласии с пользовательским соглашением, нажмите кнопку “Submit”

# РЕГИСТРАЦИЯ В PATHWAY STUDIO



При успешной регистрации Вы увидите окно выше.

Совет: если по каким либо причинам регистрация не прошла, попробуйте повторить процедуру с другим адресом электронной почты.

Pathway Studio Free Trial

## Get more out of your research data

Elsevier's Pathway Studio helps you interpret your experimental data, and get a more complete picture of the underlying biology of diseases, responses to drugs, and a wide range of biological processes.

Login

Please enter your username and password to login.

Username:

Password:

[Login](#) [Forgot password?](#) [Register](#) [Activate Remote Access](#)

### Pathway Studio News: September

**NEW!** [Key Opinion Leader Webinar](#)  
Attend a seminar on Immunology therapeutics and learn about new innovations, preclinical and clinical trial issues and discovery of novel immune-therapy drug targets. Read more Sept 12, 2017 at 11 AM EDT [Register](#) today.

[New Case Study: Target Identification and Prioritization using Pathway Studio](#)  
A Pathway Studio workflow is discussed that uses Curated Pathways as scaffolds, and

Вернитесь на страницу входа Pathway Studio введите логин (Ваш адрес электронной почты) и установленный пароль, установленные ранее.

# PATHWAY STUDIO LOGIN PAGE

В некоторых случаях Вы увидите промежуточную страницу входа.

Выберите на ней наиболее релевантный вариант доступа.  
(Или любой в случае отсутствия релевантного)

Pathway Studio

Get more out of your research data

Elsevier's Pathway Studio helps you interpret your experimental data, and get a more complete picture of the underlying biology of diseases, responses to drugs, and a wide range of biological processes.

Login

To log in please select one of the departments below.

- [Elsevier - Demonstration Account, Self-Managed Remote Access](#)
- [Elsevier - Demonstration Account, \\*\\* Elsevier Juniper IP \\*\\* \(Dayton\)](#)

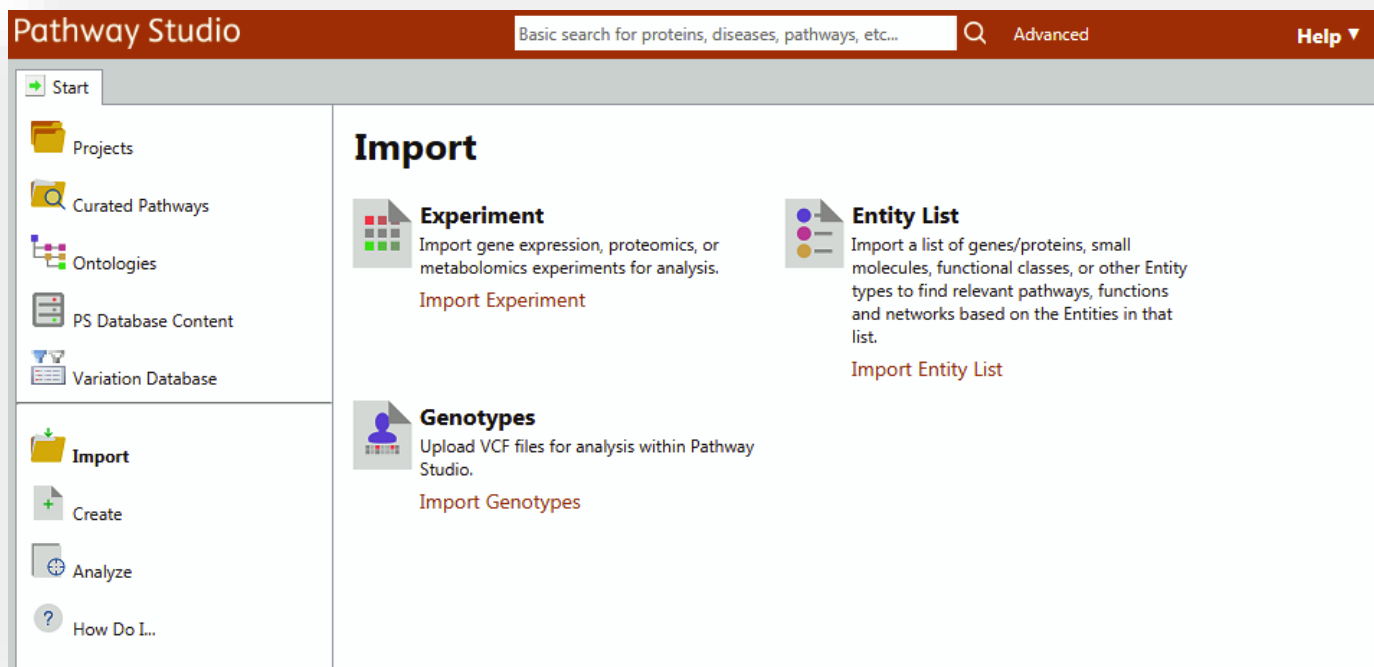
**Pathway Studio News: September**

**NEW!** **Key Opinion Leader Webinar**  
Attend a seminar on Immunology therapeutics and learn about new innovations, preclinical and clinical trial issues and discovery of novel immune-therapy drug targets. Read more Sept 12, 2017 at 11 AM EDT [Register](#) today.

**New Case Study: Target Identification and Prioritization using Pathway Studio**  
A Pathway Studio workflow is discussed that uses Curated Pathways as scaffolds, and, current published literature coupled with experimental data to define a *de novo* disease model containing novel and known targets. Read the [paper](#)

УРА!!! Добро пожаловать в Pathway Studio

Если Вы ведете похожий экран, Вы зашли в Pathway Studio



# СИСТЕМНЫЕ ТРЕБОВАНИЯ PATHWAY STUDIO

	<b>Recommended</b>	<b>Not Supported</b>
<b>Google Chrome</b>	Version 15 and higher	
<b>Firefox</b>	Version 30 and higher	Version 10 or lower
<b>Internet Explorer</b>	Version 11 and higher	Version 8 or lower
<b>Safari</b>	Version 5.1 and higher	Version 5.0 or lower
<b>Opera</b>	Version 10 and higher	

## Notes:

1. Use with configurations not identified above may be possible but is not currently supported.
2. Performance depends on processor speed, RAM, and Internet speed.
3. Screen resolution of 1024x768 or higher is recommended.
4. Use of Pathway Studio on mobile devices may be possible but not currently supported.
5. Use on Windows, MacOS and Linux is supported.

# КАК ВОЙТИ В REAXYS MEDICINAL CHEMISTRY


При наличии доступа по IP-адресам для доступа в Reaxys Medicinal Chemistry перейдите по ссылке

<https://www.reaxys.com/>

Reaxys<sup>®</sup>

Sign in 

[Quick search](#) [Query builder](#) [Results](#) [Synthesis planner](#) [History](#)

Import 

Search substances, reactions, documents and bioactivity data

in Reaxys, Reaxys Medicinal Chemistry, PubChem, eMolecules, LabNetwork and SigmaAldrich

 Documents, e.g. publications about quasicrystals

AND



Create Structure or Reaction Drawing

ELSEVIER

© 2018 RELX Intellectual Properties SA.

[Terms and Conditions](#) [Privacy policy](#) [Performance Page](#)

Cookies are used by this site.

To decline or learn more, visit our [Cookies page](#)

 RELX Group™

Feedback 

# ОРИГИНАЛЬНЫЕ УЧЕБНЫЕ МАТЕРИАЛЫ PATHWAY STUDIO

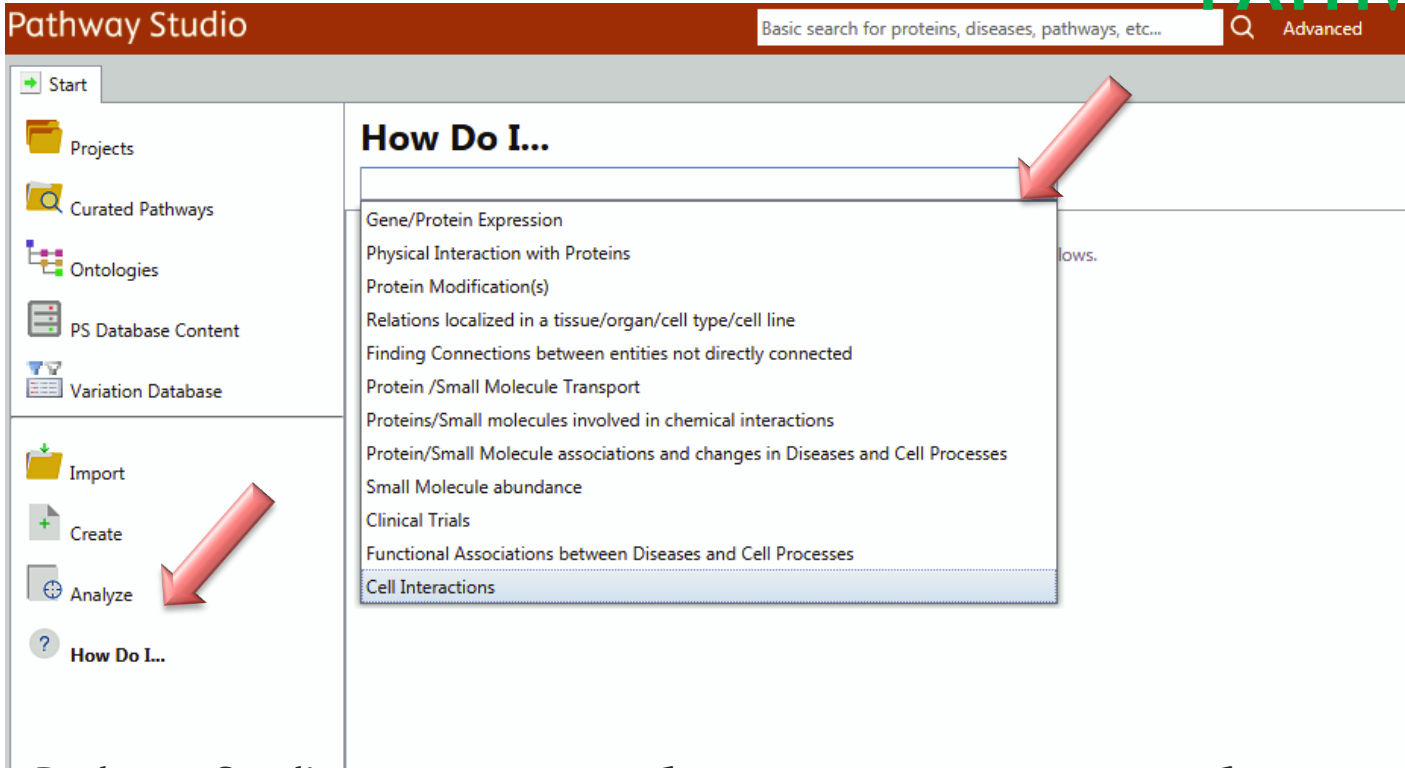
The screenshot displays the Pathway Studio web application interface. On the left, a navigation sidebar includes options like Start, Projects, Curated Pathways, Ontologies, PS Database Content, Variation Database, Import, Create, Analyze, and How Do I... The main content area shows a search for help results. A red arrow points to the search bar containing the text "PATHWAY STUDIO® Your Mammal". Another red arrow points to the "Training Material" option in the Help dropdown menu. The search results page is titled "Self-Guided Training Materials for Pathway Studio Web" and lists guides such as "Guides to Building Pathways" and "Quick Reference Guide of the Data Model".

Pathway Studio предлагает набор материалов для самообучения (на английском языке):

Меню Help \ Training Materials \ напишите интересующий вопрос в поле “Search for help...”



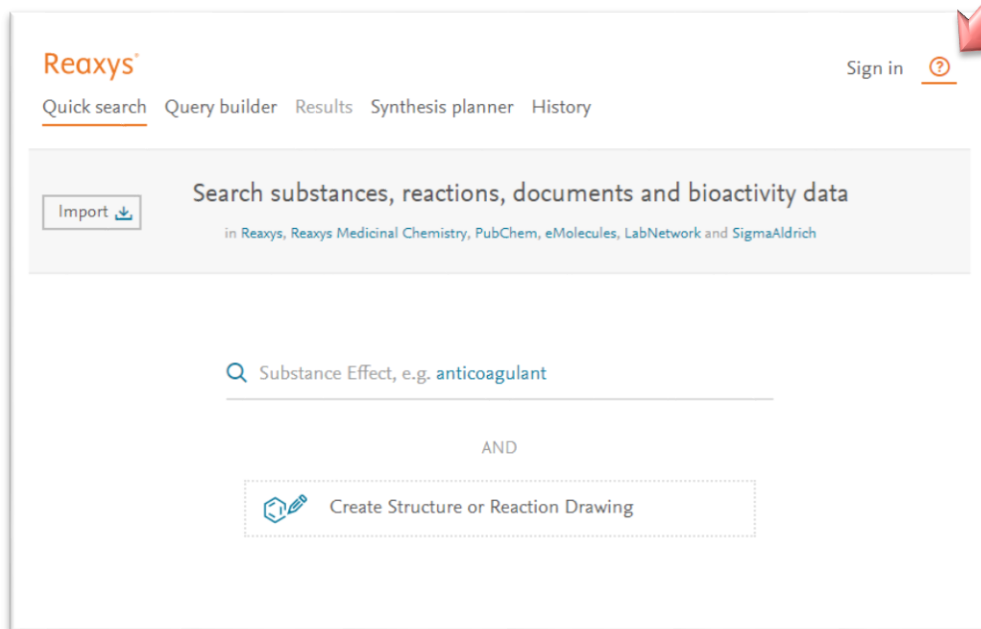
# ОРИГИНАЛЬНЫЕ УЧЕБНЫЕ МАТЕРИАЛЫ PATHWAY STUDIO?




Pathway Studio предлагает набор материалов для самообучения (на английском языке):


Вкладка “How do I...” \ выберите интересующую проблему

# ОРИГИНАЛЬНЫЕ УЧЕБНЫЕ МАТЕРИАЛЫ REAXYS MEDICINAL CHEMISTRY



Reaxys<sup>®</sup> Sign in 


[Quick search](#) [Query builder](#) [Results](#) [Synthesis planner](#) [History](#)

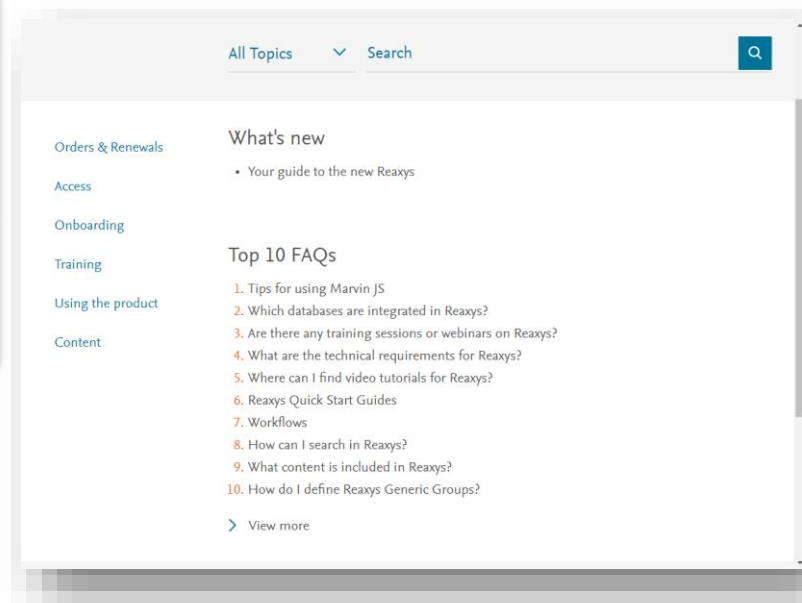
Import 



Search substances, reactions, documents and bioactivity data  
in Reaxys, Reaxys Medicinal Chemistry, PubChem, eMolecules, LabNetwork and SigmaAldrich

Q Substance Effect, e.g. anticoagulant

AND

 Create Structure or Reaction Drawing



All Topics  Search 

Orders & Renewals

Access

Onboarding

Training

Using the product

Content

### What's new

- Your guide to the new Reaxys

### Top 10 FAQs

- Tips for using Marvin JS
- Which databases are integrated in Reaxys?
- Are there any training sessions or webinars on Reaxys?
- What are the technical requirements for Reaxys?
- Where can I find video tutorials for Reaxys?
- Reaxys Quick Start Guides
- Workflows
- How can I search in Reaxys?
- What content is included in Reaxys?
- How do I define Reaxys Generic Groups?

[View more](#)

Reaxys Medicinal Chemistry предлагает набор материалов для самообучения (на английском языке). Для перехода кликните по ссылке обозначенной выше (вопросительный знак в круге).

# ОРИГИНАЛЬНЫЕ УЧЕБНЫЕ МАТЕРИАЛЫ REAXYS MEDICINAL CHEMISTRY

Reaxys Medicinal Chemistry предлагает набор материалов для самообучения (на английском языке). Некоторые из них доступны по ссылкам ниже:

## [Workflows](#)

[How do I search for substances using Reaxys Medicinal Chemistry?](#)

[RMC Quick Start Guide](#)

[Heatmap Quick Start Guide](#)

[What types of MedChem queries are possible?](#)