**🚀 100 Ways to Unlock the Power of ChEMBL\_35 for Drug Discovery & Development**

If you're working in pharmaceutical R&D, bioinformatics, or machine learning for drug design, this is for you! 📊

Over the past few months, I’ve been integrating **ChEMBL\_35** with **RDKit**, **PostgreSQL**, and **Python**, and I’m excited to share **100 high-impact topics** that demonstrate how this public bioactivity database can supercharge your research pipeline—from hit discovery to clinical strategy.

**🔬 Why ChEMBL\_35?**

ChEMBL\_35 is a treasure trove of curated bioactivity data from medicinal chemistry literature, including:

* Over **2 million compounds**
* Hundreds of thousands of **IC50, Ki, EC50** values
* Links to **targets**, **pathways**, and **clinical phases**

**💡 What Can You Do with It?**

Here are just a few ideas:

* Predict bioactivity using **QSAR models**
* Mine **lead-like molecules** and filter using **Lipinski’s Rule of 5**
* Run **virtual screening** or **SAR analysis**
* Extract **GPCR/kinase inhibitors**
* Build AI-powered platforms with **Streamlit** + **RDKit**
* Link compounds to **PubChem, DrugBank, UniProt, and PDB**

We’ve grouped these 100 topics into 7 categories:

1. **Lead Discovery**
2. **Target-Based Analysis**
3. **Clinical & Translational Insight**
4. **AI/ML for Drug Design**
5. **Cheminformatics & Molecular Design**
6. **Data Visualization & Dashboards**
7. **Integrating External Datasets**

🧠 Whether you're a **computational chemist**, **data scientist**, or **clinical researcher**, this list is your **idea bank** to spark innovation and accelerate drug discovery.

👉 Want the full list in **CSV, PDF, or Mindmap**?  
💬 Comment below or DM me — happy to share!

#CheMBL35 #DrugDiscovery #AIforHealth #Cheminformatics #BioactivityMining #RDKit #MachineLearning #OpenScience #PharmaceuticalResearch #PostgreSQL #Python #Streamlit #TargetIdentification #nghiencuuthuoc #xuatxucongthuc #AI4Pharma #R4Pharma #R4Researchers #PharmApp #sachxuanhoylyso #nyls

https://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/khai-thac-du-lieu-chembl35-trong-tri.html

**🚀 100 Cách Ứng Dụng Dữ Liệu ChEMBL\_35 Trong Nghiên Cứu & Phát Triển Thuốc**

Nếu bạn đang làm việc trong lĩnh vực **nghiên cứu thuốc**, **tin sinh học**, hoặc **AI cho y dược**, thì đây chính là tài liệu bạn không nên bỏ lỡ! 🔍💊

Trong thời gian gần đây, tôi đã tích hợp cơ sở dữ liệu **ChEMBL\_35** với **RDKit**, **PostgreSQL** và **Python** để xây dựng các quy trình phân tích hoạt tính sinh học, thiết kế thuốc, và mô hình hóa phân tử.

**🧪 ChEMBL\_35 là gì?**

Đây là kho dữ liệu mở bao gồm:

* Hơn **2 triệu hợp chất**
* Hàng trăm nghìn giá trị **IC50, Ki, EC50**
* Liên kết đến **protein đích**, **đường dẫn sinh học**, và **giai đoạn lâm sàng**

**💡 Bạn có thể làm gì với nó?**

Dưới đây là một vài ứng dụng nổi bật:

* Dự đoán hoạt tính bằng mô hình **QSAR**
* Lọc hợp chất **giống lead**, kiểm tra theo **quy tắc Lipinski**
* Thực hiện **virtual screening** hoặc **phân tích SAR**
* Khai thác các **inhibitor của kinase/GPCR**
* Xây dựng ứng dụng AI bằng **Streamlit + RDKit**
* Liên kết dữ liệu với **PubChem, DrugBank, UniProt, PDB**

**📂 Tôi đã tổng hợp 100 chủ đề hấp dẫn, chia thành 7 nhóm chính:**

1. **Khám phá lead**
2. **Phân tích theo đích tác dụng**
3. **Phân tích lâm sàng & dịch chuyển**
4. **AI/Machine Learning cho thiết kế thuốc**
5. **Tin sinh học phân tử & thiết kế hóa học**
6. **Trực quan hóa dữ liệu & dashboard**
7. **Tích hợp với dữ liệu từ PubChem, PDB, DrugBank…**

💡 Dù bạn là **dược sĩ nghiên cứu**, **nhà khoa học dữ liệu**, hay **chuyên gia lâm sàng**, danh sách 100 chủ đề này sẽ là **ngân hàng ý tưởng** để khai phá dữ liệu ChEMBL và tăng tốc khám phá thuốc.

👉 Muốn nhận danh sách đầy đủ dưới dạng **CSV, PDF hoặc Mindmap**?  
💬 Hãy bình luận hoặc inbox tôi nhé, mình sẵn sàng chia sẻ!

#CheMBL35 #KhámPháThuốc #AItrongYdược #TinSinhHọc #DữLiệuHoạtTính #RDKit #MachineLearning #YdượcMở #NghiênCứuDượcPhẩm #PythonDược #Streamlit #PhânTíchĐíchThuốc #nghiencuuthuoc #xuatxucongthuc #AI4Pharma #R4Pharma #R4Researchers #PharmApp #sachxuanhoylyso #nyls

https://www.nghiencuuthuoc.com/2025/05/khai-thac-du-lieu-chembl35-trong-tri.html