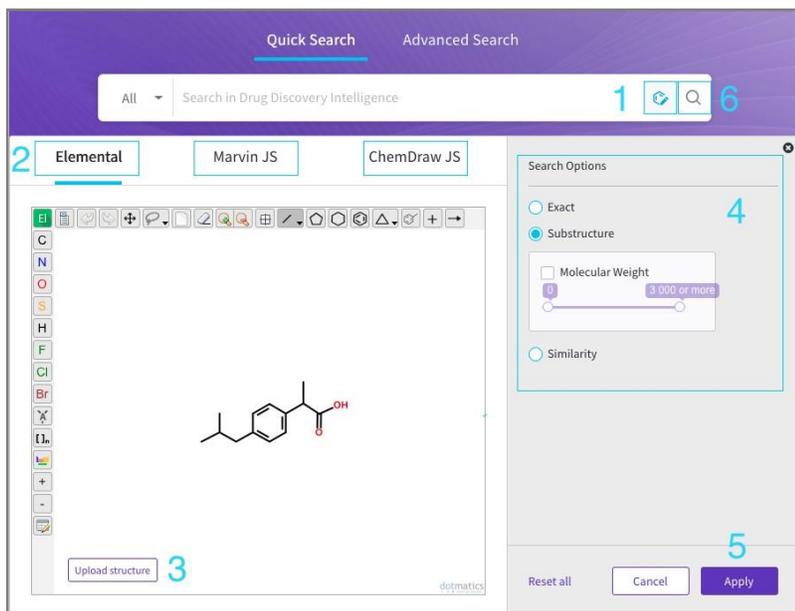


# Busca por estrutura química

## Cortellis Drug Discovery Intelligence

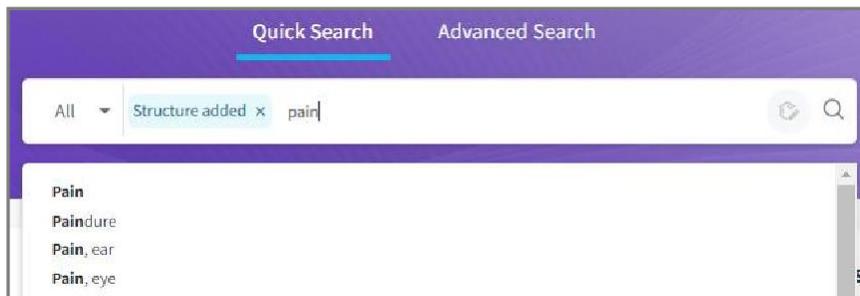
Você precisa encontrar compostos que contenham sua estrutura exata, sejam estruturalmente semelhantes ou contenham uma subestrutura de sua molécula alvo?

A pesquisa de estrutura permite identificar compostos que contêm sua molécula exata, são semelhantes à molécula alvo ou que contêm uma porção (subestrutura). A pesquisa por similaridade é diferente da pesquisa por subestrutura, pois se baseia em descritores moleculares, impressões digitais e algoritmos (mais detalhes podem ser encontrados no Apêndice). É complementar às buscas de subestrutura e estrutura exata porque retorna respostas não encontradas com essas estratégias de busca de estrutura química. Cenário de exemplo: Você é um pesquisador que trabalha com distúrbios da dor e deseja revisar o cenário de compostos obtidos por pesquisa de similaridade (ou que contêm um núcleo de subestrutura) em sua molécula candidata dentro do *Cortellis Drug Discovery Intelligence*.



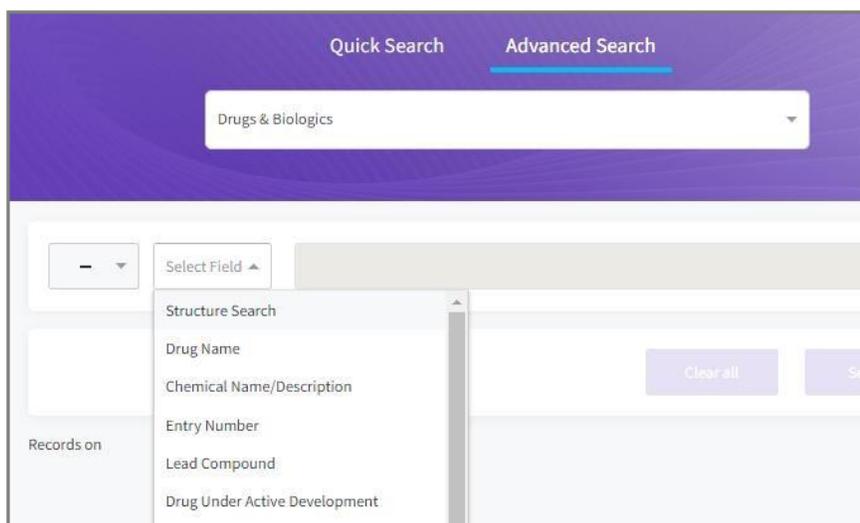
### Executando a busca

Na página inicial, clique no ícone Pesquisa de estrutura [1] na caixa Pesquisa Rápida. Selecione o editor de Pesquisa de Estrutura preferido (Elemental (padrão), Marvin JS, ou ChemDraw JS) [2]. Desenhe a estrutura que você deseja consultar usando as ferramentas de desenho de estrutura. Como alternativa, você pode carregar um arquivo mol clicando no botão Carregar estrutura. [3] Selecione o tipo de pesquisa de estrutura que deseja executar selecionando o botão Exato, Subestrutura (e, opcionalmente, selecione um intervalo de peso molecular) ou Similaridade (e selecione um intervalo % de similaridade) [4].



Quando sua estrutura estiver concluída no editor de estrutura, clique em **Aplicar** [5] para adicionar sua consulta de estrutura à caixa Pesquisa rápida, onde você pode executar diretamente a consulta [6] ou combinar com termos baseados em texto.

### Executando uma pesquisa de estrutura na Pesquisa Avançada



### Use a Busca Avançada [1].

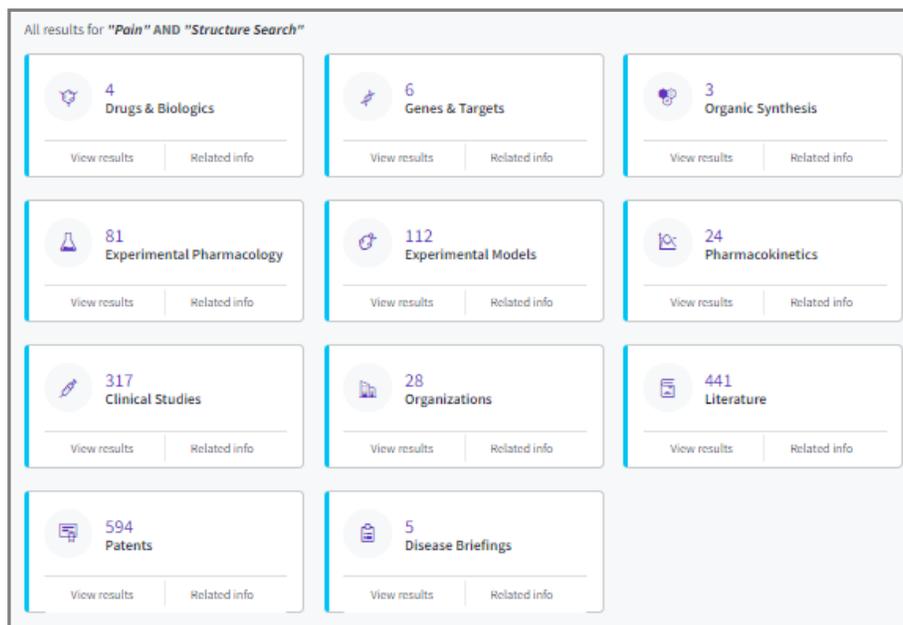
Selecione a área de conhecimento de interesse no **menu suspenso** [2].

Selecione **Pesquisa de estrutura** [4] no menu **Selecionar campo** [3] para abrir os editores de estrutura. Depois que a consulta de estrutura for adicionada (consulte a página anterior sobre como fazer isso), você poderá selecionar campos adicionais de relevância para sua **Pesquisa Avançada** e clicar em **Pesquisar** para executar a busca

### DICAS

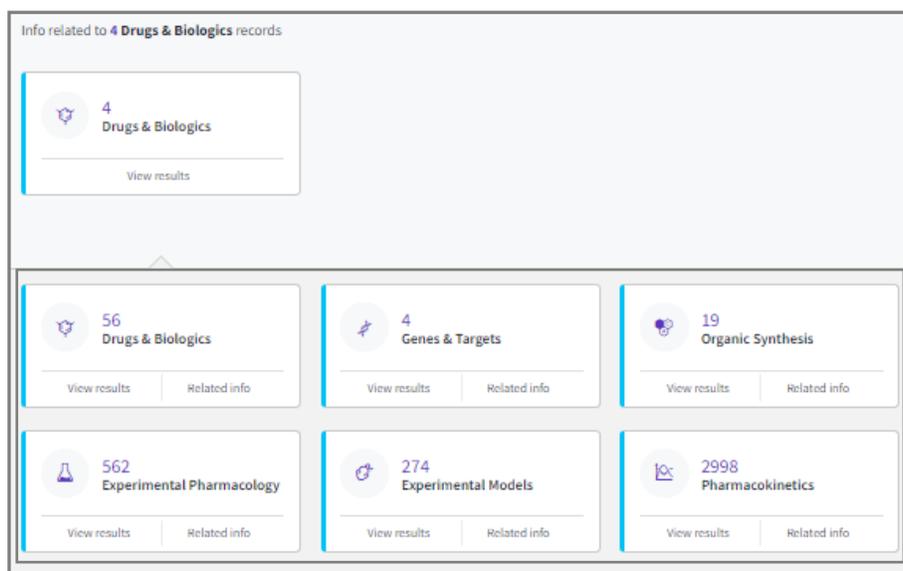
- Se você estiver usando o recurso de pesquisa de estrutura pela primeira vez, consulte o **Apêndice** para obter mais detalhes sobre os editores de estrutura. Observe que o ChemDraw JS será adicionado até o final de 2019.
- Uma pesquisa "Exata" identificará compostos contendo a estrutura exata que você desenhou. Uma pesquisa de "Subestrutura" permite encontrar compostos contendo o mesmo núcleo de subestrutura e, opcionalmente, que se enquadram na faixa selecionada de peso molecular. Finalmente, uma pesquisa de "Similaridade" permite encontrar compostos que são semelhantes à molécula candidata. O valor limite de similaridade padrão é 80%. ou seja, recuperar estruturas que sejam pelo menos 80% semelhantes à consulta; isso pode ser ajustado manualmente pelo uso

## Trabalhando com seus dados



Tendo executado a consulta (exemplo usado é uma Pesquisa Rápida, incluindo uma pesquisa de similaridade de estrutura (>80%) do composto de interesse E o termo Dor), os resultados são encontrados em todas as áreas de conhecimento em Cortellis Drug Discovery Intelligence.

Para visualizar os compostos recuperados, clique no cartão **Drug & Biologics** clicando no número de resultados encontrados ou no botão **Exibir resultados**.



Alternativamente, para identificar todo o conteúdo relacionado aos compostos identificados, clique no botão **Informações relacionadas** no cartão.

As informações relacionadas são exibidas imediatamente na metade inferior da tela.

The screenshot displays a table of drug and biologic records. The table has columns for Entry Number, Similarity, Code Name, Generic Name, Brand Name, Product Category, Therapeutic Group, Mechanism of Action, and Organization. The first row shows a record with 100.0% similarity, Code Name BC-1054, Generic Name Ibuprofen, and Brand Name Advil. A 'Similarity' filter is applied, and an 'Apply Filters' panel is open on the right, showing various filter options like 'Under Active Development', 'Development Status', and 'Milestones'.

Os resultados são ordenados por % de similaridade (para uma pesquisa de similaridade de estrutura) ou por relevância para a consulta para uma pesquisa exata ou de subestrutura [1]. Para visualizar as informações de status de desenvolvimento ou dados de marcos para os compostos de interesse, clique em suas respectivas abas [2]. Para refinar ainda mais seus resultados, clique em **Aplicar filtros** [3] e escolha entre as muitas opções disponíveis para filtragem. Para saber mais sobre um composto específico, clique no Número de **Entrada** para abrir a página da entidade farmacêutica [4].

The detailed view for Ibuprofen shows the following information:

- Code Name:** BC-1054; ST-1482; SST-0225; ZAG-1701; OXP-001; TIB-200
- Generic Name:** Ibuprofen
- Brand Name:** Nurofen; Spedifen; Nurofen Meltlets; Brufen Retard; Brufen; Aktren; Advil; Motrin; Ibuprox; CDT-Ibuprofen; Algiflor; Amelior; Caldolor; Fedlea; OXPzero Ibuprofen; Dolgit
- Molecular Formula:** C<sub>13</sub>H<sub>18</sub>O<sub>2</sub>
- Molecular Weight:** 206.281
- Chemical Name/Description:** (±)-2-[4-(isobutylphenyl)propionic acid; alpha-Methyl-4-(isobutyl)phenylacetic acid
- CAS Registry Number\*:** 527688-20-6 (sodium salt) 015687-27-1
- Standard InChI:** InChI=1S/C13H18O2/c1-9(2)(8-11-4-6-12)(7-5-11)(3)(13)(14)(15)/h4-7,9-10H,8H2,1-3H3,(H,14,15)
- Standard InChIKey:** HEFNNWSXXWATRW-UHFFFAOYSA-N

The 'Related Content' sidebar lists the following categories and counts:

- Drugs & Biologics: 55
- Genes & Targets: 4
- Organic Synthesis: 19
- Experimental Pharmacology: 559
- Experimental Models: 274
- Pharmacokinetics: 2983
- Clinical Studies: 796

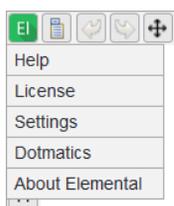
A página da entidade farmacêutica mostra informações sobre o medicamento, incluindo um **resumo do produto**, propriedades do produto, resumo do status de desenvolvimento e **informações regulatórias**. Para obter mais detalhes sobre o status de desenvolvimento e marcos sobre a droga, clique em suas respectivas guias. No lado direito você encontrará fácil acesso ao conteúdo relacionado em outras áreas de conhecimento para o seu registro.

## Apêndice

### Editores de estrutura

Para obter mais informações sobre os editores de estrutura disponíveis no *Cortellis Drug Discovery Intelligence*, consulte as seguintes informações e guias do usuário:

- Elemental: <https://www.dotmatics.com/products/elemental>



Além disso, o menu Ajuda dentro do editor Elemental abre um arquivo pdf que mostra os principais recursos do desenho.

1. Marvin JS: <https://docs.chemaxon.com/display/docs/Marvin+JS+User%27s+Guide>
1. ChemDraw JS: <http://media.cambridgesoft.com/support/manuals/16/ChemDrawHelp.pdf>

### Pesquisa por similaridade - descritores moleculares, impressões digitais e algoritmos

A pesquisa por similaridade encontra moléculas semelhantes à estrutura da consulta. O cálculo aplica o coeficiente de Tanimoto que tem dois argumentos:

2. a impressão digital (uma cadeia de caracteres de bits que contém informações estruturais sobre a molécula) da estrutura da consulta
3. a impressão digital da molécula no banco de dados

O coeficiente de Tanimoto é calculado pela seguinte fórmula:

$$NA \& B / (NA + NB - NA \& B)$$

Onde NA e NB são o número de bits definidos na molécula A e B, respectivamente, NA&B é o número de bits que são definidos em ambos.

O limiar de similaridade especifica um limite inferior para os coeficientes de Tanimoto. Se um valor do Tanimoto for maior que o limite, a estrutura da consulta e a estrutura do banco de dados fornecida serão consideradas semelhantes.

Limite de similaridade: O valor deve estar entre 0 e 100%.

Um limite maior resulta em menos acertos que são mais semelhantes à estrutura da consulta.

Para obter mais informações, entre em contato com o Atendimento ao Cliente no [Suporte ao Produto LS](#)