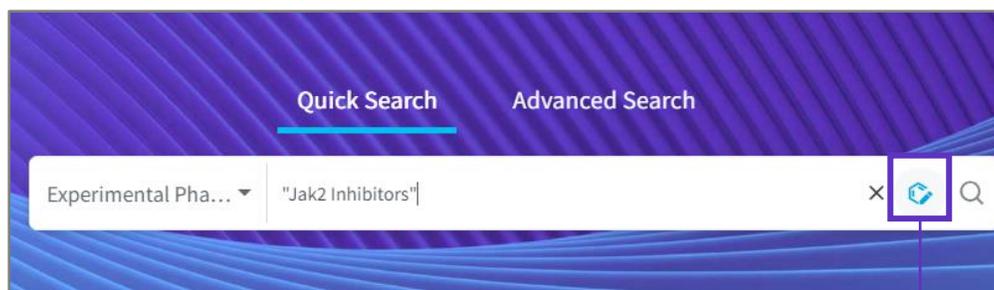


# Comparar o desempenho de seu fármaco/biológico

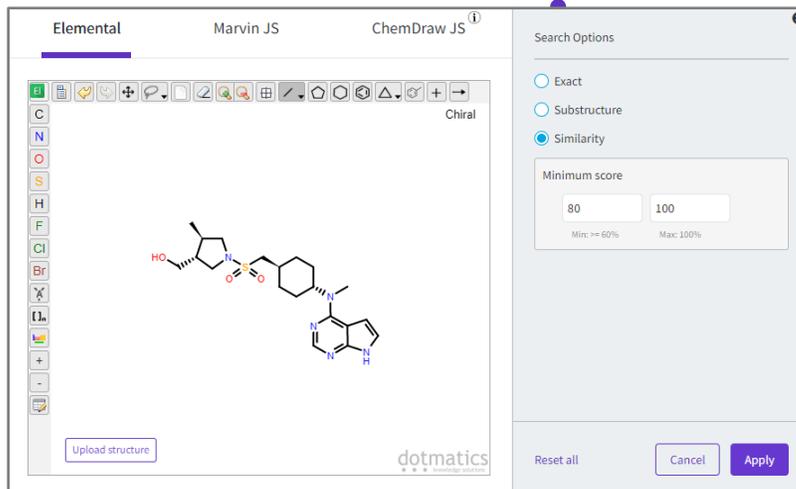
## Cortellis Drug Discovery Intelligence

Faça uma avaliação comparativa facilmente dos seus fármacos de interesse utilizando as ferramentas analíticas da Área de Conhecimento em Farmacologia Experimental.

1. Faça uma pesquisa rápida em **Farmacologia Experimental**, por exemplo, para encontrar dados experimentais sobre inibidores de Jak2.



Para avaliar o desempenho de uma estrutura específica, comece com uma pesquisa de similaridade de estrutura. Isso recuperará dados experimentais para estruturas semelhantes às suas, para que você possa comparar desempenhos.



Elemental   Marvin JS   ChemDraw JS <sup>(i)</sup>

Chiral

Upload structure

dotmatics

Search Options

Exact

Substructure

Similarity

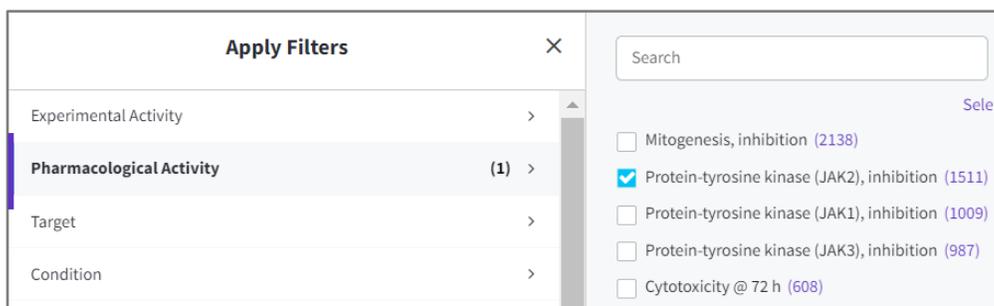
Minimum score

80   100

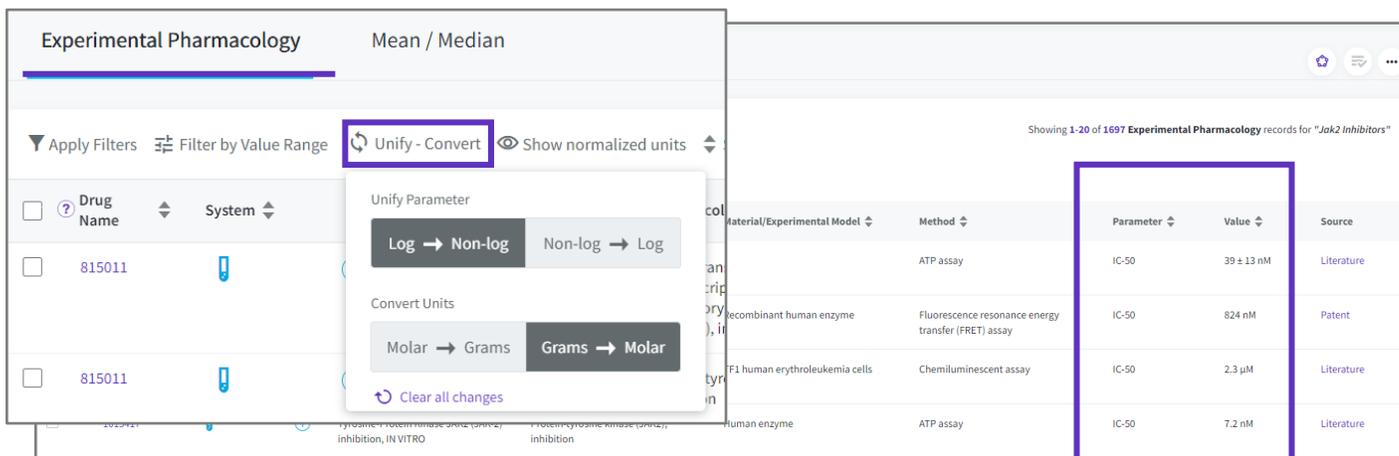
Min: >= 60%   Max: 100%

Reset all   Cancel   Apply

- Na página de resultados, use **aplicar filtros** para selecionar a **atividade farmacológica** que você gostaria de comparar, por exemplo, inibição de Jak2.



- Parâmetros e Valores na página de resultados podem aparecer em diferentes formas (Log/Non-log) e unidades (Grams/Molar), dependendo da fonte dos dados. Use a funcionalidade Unificar - Converter para resolver isso.**



Material/Experimental Model	Method	Parameter	Value	Source
	ATP assay	IC-50	39 ± 13 nM	Literature
recombinant human enzyme	Fluorescence resonance energy transfer (FRET) assay	IC-50	824 nM	Patent
HL60 human erythroleukemia cells	Chemiluminescent assay	IC-50	2.3 µM	Literature
Human enzyme	ATP assay	IC-50	7.2 nM	Literature

4. Para ver todos os resultados normalizados na mesma unidade, clique em **Mostrar unidades normalizadas**. Isso adicionará uma coluna extra à página de resultados, onde você poderá selecionar sua unidade normalizada preferida ( $\mu\text{mol}$  ou  $\mu\text{g}$ ).

The screenshot shows the 'Experimental Pharmacology' section with a 'Mean / Median' tab. A button labeled 'Show normalized units' is highlighted with a red box. Below it, a table of results is displayed. The 'Value' column has a dropdown menu open, showing 'Value ( $\mu\text{g}$ )' selected, also highlighted with a red box. The table contains four rows of data for Tyrosine-Protein Kinase JAK2 (JAK-2) inhibition, IN VITRO, with values ranging from  $309.33 \times 10^6 \mu\text{g/l}$  to  $320.37 \times 10^6 \mu\text{g/l}$ .

Classifique seus experimentos por **Valor** para obter os fármacos mais ativos no topo da sua lista.

5. Uma vez que seus resultados são unificados e convertidos, você pode ver muitos experimentos medindo a mesma droga para a mesma atividade com o mesmo parâmetro. Use a **guia Média/Mediana** na parte superior da página para calcular os valores médios e medianos para esses experimentos semelhantes.

The screenshot shows the 'Mean / Median' calculation interface. It includes options to select sources (Literature and Patents), checkboxes for 'Would you want to consider only the same Material in the calculation?' and 'Would you want to consider only the same Method in the calculation?' (both set to 'No'), and a section for selecting parameters (IC-50 (M), IC-90 (M), Kd (M), and Ki (M)). A 'Calculate' button is at the bottom right.

Classifique seus experimentos por **Valor** para obter os medicamentos mais ativos no topo da sua lista.

1. Agora você pode facilmente comparar fármacos com os valores farmacológicos mais interessantes na página de resultados médios/medianos.

Experimental Pharmacology		Mean / Median		
Drug Name	Pharmacological Activity	Parameter	Mean	Median
1009088	Protein-tyrosine kinase (JAK2), inhibition	IC-50	6.2 nM [6.2 - 6.2] (n=3)	6.2 nM [6.2 - 6.2] (n=3)
1009089	Protein-tyrosine kinase (JAK2), inhibition	IC-50	1 pM [1 - 1] (n=3)	1 pM [1 - 1] (n=3)
1009090	Protein-tyrosine kinase (JAK2), inhibition	IC-50	2.1 nM [2.1 - 2.1] (n=3)	2.1 nM [2.1 - 2.1] (n=3)
1009091	Protein-tyrosine kinase (JAK2), inhibition	IC-50	1.4 nM [1.4 - 1.4] (n=3)	1.4 nM [1.4 - 1.4] (n=3)
1009092	Protein-tyrosine kinase (JAK2), inhibition	IC-50	5.53 nM [5.4 - 5.6] (n=3)	5.6 nM [5.4 - 5.6] (n=3)

(n=x) reflete o número de pontos de dados usados para calcular a média/mediana

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