

UNIVERZA V LJUBLJANI  
FAKULTETA ZA FARMACIJO

IVANA GRŽANIĆ

**MAGISTRSKA NALOGA**

ENOVITI MAGISTRSKI ŠTUDIJ FARMACIJA

Ljubljana, 2016

UNIVERZA V LJUBLJANI  
FAKULTETA ZA FARMACIJO

IVANA GRŽANIĆ

**NAPOVEDOVANJE MOŽNEGA ENDOKRINEGA DELOVANJA  
UČINKOVIN V ZDRAVILIH, REGISTRIRANIH V REPUBLIKI  
SLOVENIJI, Z RAČUNALNIŠKIM  
PROGRAMOM ENDOCRINE DISRUPTOME**

**PREDICTION OF THE POTENTIAL ENDOCRINE ACTIVITY OF  
DRUGS IN MEDICINES REGISTERED IN REPUBLIC OF  
SLOVENIA USING COMPUTER PROGRAM ENDOCRINE  
DISRUPTOME**

ENOVITI MAGISTRSKI ŠTUDIJ FARMACIJE

Ljubljana, 2016

Magistrsko nalogo sem opravljala na Fakulteti za farmacijo pod mentorstvom prof. dr. Marije Sollner Dolenc.

## **ZAHVALA**

*Zahvaljujem se mentorici, prof. dr. Mariji Sollner Dolenc, mag. farm., za strokovno pomoč, nasvete in spodbudo pri izdelavi magistrske naloge.*

*Posebna zahvala gre tudi mojim najbližjim za razumevanje, podporo in spodbujanje tekom študija.*

## **IZJAVA**

Izjavljam, da sem magistrsko nalogo samostojno izdelala pod mentorstvom prof. dr. Marije Sollner Dolenc, mag. farm.

Ivana Gržanić

Predsednik magistrske komisije: izr. prof. dr. Iztok Grabnar

Član magistrske komisije: asist. dr. Zoran Lavrič

## VSEBINA

1. UVOD.....	1
1.1 Endokrini sistem .....	1
1.2 Motilci delovanja endokrinega sistema .....	1
1.3 Jedrni receptorji .....	3
1.3.1 Androgeni receptor.....	5
1.3.2 Estrogenski receptor.....	6
1.3.3 Glukokortikoidni receptor .....	7
1.3.4 Jetrni X receptor .....	7
1.3.5 S peroksisomskim proliferatorjem aktivirani receptor .....	8
1.3.6 Retinoidni X receptor $\alpha$ .....	9
1.3.7 Receptorji za ščitnične hormone .....	10
1.3.8 Ostali jedrni receptorji, za katere so znani bodisi endogeni ali eksogeni ligandi .....	11
1.3.9 Receptorji sirote .....	13
1.4. Testni sistemi za ugotavljanje endokrinega delovanja ksenobiotikov .....	13
1.4.1 Regulatorne potrebe in perspektive.....	13
1.4.2 Vloga OECD pri razvoju testnih sistemov za ugotavljanje endokrinega delovanja ksenobiotikov .....	14
1.4.3 Računalniška orodja za napovedovanje možnega endokrinega učinka s pomočjo sidranja .....	14
2. NAMEN DELA .....	16
3. MATERIALI IN METODE .....	17
3.1 Materiali.....	17
3.1.1 Centralna baza zdravil.....	17
3.2. Metode .....	18
3.2.1 Endocrine Disruptome.....	18
3.2.1.1 Spletni vmesnik .....	19
3.2.1.2 Uporaba programa .....	19
3.2.1.3 Ravnanje s podatki .....	20
3.2.1.4 Razlaga rezultatov .....	21

3.2.1.5 Omejitve programa .....	21
3.2.2 Iskanje strukture zdravilnih učinkovin .....	22
3.2.2.1 DrugBank .....	22
3.2.2.2 ChemSpider .....	22
3.2.2.3 ChEMBL .....	23
3.2.3 Preverjanje strukture zdravilnih učinkovin po IUPAC imenu .....	24
3.2.3.1 ChemDraw Professional 15.0 .....	24
3.2.4 Razlaga rezultatov .....	25
3.2.4.1 PubChem .....	25
3.2.5 Statistična ocena napovednosti programa .....	26
4. REZULTATI IN RAZPRAVA .....	28
4.1 Ocena napovednosti ED za zdravilne učinkovine, ki preko vezave na jedrne receptorje izkazujejo farmakološko delovanje .....	29
4.1.1 Zdravilne učinkovine, ki se vežejo na AR (skupina A) .....	29
4.1.2 Zdravilne učinkovine, ki se vežejo na ER (skupina B) .....	31
4.1.3 Zdravilne učinkovine, ki se vežejo na GR (skupina C) .....	34
4.1.4. Zdravilne učinkovine, ki se vežejo na PPAR (skupina D) .....	39
4.1.5 Zdravilne učinkovine, ki se vežejo na LXR $\alpha$ , LXR $\beta$ , RXR $\alpha$ , TR $\alpha$ in TR $\beta$ (skupina E) .....	41
4.2 Zdravilne učinkovine, za katere program ED napoveduje vsaj za en receptor vezavo razvrščeno v razred »rdeč« .....	43
4.2.1 Primerjava rezultatov pridobljenih z računalniškim programom ED z ostalimi znanimi in objavljenimi podatki za učinkovine, katere primarna tarča niso nekateri od 12 obravnavanih jedrnih receptorjev .....	44
4.2.2 Učinkovine, ki so bile za katerikoli receptor uvrščene v razred »rdeč«, vendar o tem v dostopni literaturi ni podatkov .....	49
4.3 Ocena napovednosti programa .....	52
5. SKLEP .....	55
6. LITERATURA .....	56

## **KAZALO SLIK**

Slika 1: Napovedna stran računalniškega programa Endocrine Disruptome .....	20
Slika 2: ChemDraw Professional (verzija 15.0) izvajanje postopka pretvorbe imena zdravilne učinkovine do kemijske strukture. ....	25

## **KAZALO PREGLEDNIC**

Preglednica I: Pridobljeni rezultati vezave (vezalna energija) zdravilnih učinkovin, ki se uporabljajo za moduliranje AR in njihova ATC klasifikacija. ....	30
Preglednica II: Pridobljeni rezultati vezave (vezalna energija) zdravilnih učinkovin, ki se uporabljajo za moduliranje ER in njihova ATC klasifikacija. ....	33
Preglednica III: Pridobljeni rezultati vezave (vezalna energija) zdravilnih učinkovin, ki se uporabljajo za moduliranje GR in njihova ATC klasifikacija. ....	36
Preglednica IV: Pridobljeni rezultati vezave (vezalna energija) zdravilnih učinkovin, ki se uporabljajo za moduliranje PPAR in njihova ATC klasifikacija. r .....	40
Preglednica V: Pridobljeni rezultati vezave (vezalna energija) zdravilnih učinkovin, ki se uporabljajo za moduliranje RXR $\alpha$ in TR in njihova ATC klasifikacija. ....	42
Preglednica VII: Učinkovine, za katere je ED določil njihovo možno delovanje preko moduliranja posameznih jedrnih receptorjih in zanje v literaturi še ni podatkov. ....	50
Preglednica VI: Pridobljeni rezultati vezave (vezalna energija) zdravilnih učinkovin, za katere računalniški program Endocrine Disruptome napoveduje vezavo, razvrščeno v razred »rdeč« vsaj za en receptor. Preglednica je sestavljena po njihovi ATC klasifikaciji. ....	93

## **KAZALO PRILOG**

Priloga 1: .....	69
Priloga 2: .....	93

## POVZETEK

Vse bolj raste zavest o motilcih delovanja endokrinega sistema, ki vplivajo na javno zdravje in kakovost življenja posameznika. Jasno je tudi, da imajo tudi nekatere zdravilne učinkovine takšno neželjeno delovanje, kar je potrjeno z več študijami. Za lažje ovrednotenje delovanja spojin na endokrini sistem preko moduliranja jedrnih receptorjev je bil izdelan računalniški program Endocrine Disruptome (<http://endocrinedisruptome.ki.si/>), ki kot rezultat poda tabelo z barvno lestvico z razredi »rdeč«, ki kaže na visoko verjetnost vezave; »zelen«, ki ustreza nizki verjetnosti vezave; in dva vmesna razreda »oranžen« in »rumen«, za 12 jedrnih receptorjev: androgene receptorje,  $\alpha$ - in  $\beta$ -estrogenske receptorje, glukokortikoidni receptor, jetrni X receptor  $\alpha$  in  $\beta$ , s peroksisomskim proliferatorjem aktivirani receptorji  $\alpha$ ,  $\beta/\delta$  in  $\gamma$ , retinoidni X receptor  $\alpha$  in tiroidni receptorji  $\alpha$  in  $\beta$ . To računalniško orodje temelji na metodi sidranja in podaja afiniteto vezave med ligand vezavnim mestom receptorja in preiskovano spojino.

Z računalniškim programom Endocrine Disruptome smo pridobili podatke o jakosti vezave med 762 zdravilnimi učinkovinami in 12 jedrnimi receptorji. Rezultate napovedovanja afinitete vezave na jedrne receptorje smo razvrstili v 3 skupine. V prvo skupino sodijo zdravilne učinkovine, ki preko vezave na jedrne receptorje izkazujejo farmakološko delovanje. V drugo skupino sodijo zdravilne učinkovine, katerih prvotna tarča ni noben med 12-imi obravnavanimi jedrnimi receptorji, vendar pa jih Endocrine Disruptome razvrsti v razred »rdeč« vsaj za en receptorski sistem. V tretjo skupino sodijo zdravilne učinkovine, za katere program ne napove vezave na noben preizkušan jedrni receptor z visoko afiniteto.

Našli smo 70 spojin, za katere napovedni računalniški program Endocrine Disruptome napoveduje visoko afiniteto vezave na posamezne jedrne receptorje, za katere do zdaj še niso bile objavljene nobene študije in tovrstne interakcije v literaturi tudi niso bile omenjene. Za potrditev napovedovanja vezave teh spojin z Endocrine Disruptom-om in posledično njihovih možnih neželenih učinkov bi bilo potrebno izvesti najprej še *in vitro* študije vezave spojine na izoliran receptor in funkcijski test na celičnih linijah z ekspresiranimi receptorji in reporterskim genom.

Napovednost računalniškega programa Endocrine Disruptome smo ocenili s točnostjo (59 %), specifičnostjo (63 %) in občutljivostjo (59 %). Glede na to, da smo za nekatere jedrne

receptorje lahko pridobili malo spojin, ki interagirajo s temi receptorji, je ta ocena približna in se razlikuje od receptorja do receptorja.

**Ključne besede:** hormonski motilci, jedrni receptorji, Endocrine Disruptome



## ABSTRACT

Awareness of the functioning of endocrine disruptors is growing. They affect public health and life quality of individuals. Some of the active substances clearly have undesirable impacts, which has been confirmed by several studies. The computer program (<http://endocrinedisruptome.ki.si/>) was designed for easier evaluation of compounding impacts on endocrine systems through modulation of nuclear receptors. As a result, the program provides a table with color classes: »red«, which indicates high probability of binding; »green«, which indicates low probability of binding, and two intermediate classes, »orange« and »yellow«, for 12 nuclear receptors : androgen receptors,  $\alpha$ - in  $\beta$ - estrogen receptors, glucocorticoid receptor, liver X receptors  $\alpha$  in  $\beta$ , peroxisome proliferator activated receptors  $\alpha$ ,  $\beta/\delta$  in  $\gamma$  activated with peroxisome proliferators, retinoid X receptor  $\alpha$  and thyroid receptors  $\alpha$  and  $\beta$ . This computer tool is based on the method of docking and shows binding affinity between ligands with the binding site of receptor and wanted compound.

Endocrine Disruptome computer program enables us to acquire information about affinity of 12 nuclear receptors for 762 active substances. We divided prediction results of binding affinity to nuclear receptors into three groups. The first group includes active substances which are showing pharmacological activity through bindings to nuclear receptors. The second group includes active substances whose original target does not belong to any of 12 previously mentioned nuclear receptors. However, Endocrine Disruptome sorts them out in the »red«, class, at least for one receptor system. The third group includes active substances for which the program does not predict binding in any tested nuclear receptor with high affinity.

We identified 70 compounds for which computer program Endocrine Disruptome predicts high affinity of binding to the specific nuclear receptors. Up till now there have not been any such studies and this kind of information has not been mentioned in literature. To confirm the prediction of binding of these compounds with Endocrine Disruptome and, consequently, their possible side effects, it is necessary to first undertake *in vitro* binding of compounds studies on an isolated receptor and functional test on cell lines with expressed receptors and reported gene.

Accuracy of prediction of Endocrine Disruptome is estimated at 59 %, its specificity at 63 % and sensitivity at 59 %. Due to the fact that for some nuclear receptors we can obtain few compounds which interact with them, this score is approximate and it varies from one receptor to another.

**Key words:** endocrine disruptors, nuclear receptors, Endocrine Disruptome

## SEZNAM OKRAJŠAV

Ahr	Arlni ogljikovodikov receptor
AR	Androgeni receptor
CAR	Konstitutivni androstanski receptor
CBZ	Centralna baza zdravil
COUP-TF	Transkripcijski faktor za specifičen protein (Chicken ovalbumin upstream promoter- transcription factor)
DoTS	Docking interface for Target Systems
ED	Endocrine Disruptome
ER	Estrogenski receptor
ERR	Estrogenskim podobni receptorji
FXR	Farnezoidni X receptor
GCNF1	Jedrni faktor zarodnih celic
GR	Glukokortikoidni receptor
HNF-4	Hepatocitni jedrni faktor 4
InChI	Nezaščiten identifikator za kemične snovi
LBD	Ligand vezoča domena
LXR	Jetrni X receptor
MR	Mineralkortikoidni receptor
NGFI-B	Živčni rastni faktor, ki ga inducra klon B
NOR1	Receptor sirota 1 pridobljen iz nevronov
NTD	N-terminalna domena
NURR1	Protein 1 povezan z jedrnimi receptorji
OECD	Organizacija za ekonomsko sodelovanje in razvoj
PAINS	Strukturni elementi v molekuli, ki so lahko vzrok za določene neželene interakcije
PPAR	S peroksisomskim proliferatorjem aktivirani receptor
PR	Progesteronski receptor
PXR	Pregnanaski X receptor
RAR	Receptor retinojske kisline
ROR	Z RAR povezani receptorji sirote

RXR	Retinoidni X receptor
SE	Prag občutljivosti
SMILES	Vrstični sistem znakov za kodiranje molekularnih struktur
T3	3,5,3'-triodo-L-tironin
T4	Tiroksin
TG407	Izboljšan subkutani test
TR	Receptor za ščitnične hormone
VDR	Receptor za vitamin D
qHTS	Kvantitativno reševanje visoke zmogljivosti

# 1. UVOD

## 1.1 Endokrini sistem

Endokrini sistem v povezavi z živčnim sistemom je eden najpomembnejših sistemov v človeškem telesu, ki ureja praktično vse dejavnosti v organizmu (1). Največ vpliva ima na metabolizem in rast ter specifične funkcije, kot so hemostaza vode in mineralov, kardiovaskularna funkcija, reprodukcija in razvoj. Endokrini sistem je sistem žlez z notranjim izločanjem. Žleze izločajo hormone, ki so lahko peptidi (rastni hormon), derivati lipidov (steroidi, prostaglandini) in analogi aminokislin (dopamin, epinefrin). Nekateri hormoni delujejo na celice organa, iz katerega se izločajo, kar imenujemo parakrino delovanje. V primeru delovanja na celice, ki jih proizvajajo, gre za avtokrino delovanje. Celični odziv sprožijo preko vezave na receptorje v tarčnem tkivu. Glavne endokrine žleze so hipotalamus, hipofiza, ščitnica, obščitnica, nadledvična žleza, trebušna slinavka, jajčniki in moda (2).

Regulacija receptorjev ima pomembno vlogo v delovanju endokrinega sistema. Deluje s tako imenovano »up« ali »down« regulacijo s spreminjanjem števila receptorjev ali njihovo desenzitizacijo, kar se zgodi najpogosteje s povečanjem ali zmanjšanjem sinteze receptorjev. Učinek sproščenih hormonov je tako odvisen od števila receptorjev, koncentracije hormonov in afinitete hormonov do receptorja (3). Receptorji se tako kot vse druge beljakovine v celični membrani stalno razgrajujejo in ponovno tvorijo (1).

Motnje endokrinega sistema so posledica presežka ali pomanjkanja določenih hormonov, zato pri zdravljenju endokrinih boleznih skušamo na različne načine ohraniti homeostazo njihovega delovanja (2). Ene najpogostejših boleznih na področju endokrinologije so sladkorna bolezen tipa 1, Gravesova bolezen in manj pogostejši tumor hipofize (2).

## 1.2 Motilci delovanja endokrinega sistema

Obstaja več različnih definicij endokrinih (hormonskih) motilcev (4). Vse mednarodne opredelitve določajo, da so to eksogene snovi, ki povzročajo škodljive učinke na endokrini sistem v nepoškodovanem organizmu in se lahko izrazijo na njegovih potomcih (5-7).

Vplivajo na homeostazo oz. normalno celično presnovo, plodnost, vedenje in razvoj (4). Na splošno so opisani kot snovi, ki imajo (proti)estrogeno in (proti)androgeno delovanje, čeprav vplivajo tudi na druge tarče (4,5). Svetovna zdravstvena organizacija (WHO) opredeljuje neželene učinke kot spremembo v morfologiji, fiziologiji, rasti, razmnoževanju, razvoju ali življenjski dobi organizma (6).

Hormonski motilci dosežejo učinek prek različnih mehanizmov (4). Prvotna predpostavka je bila, da se vežejo direktno na jedrne receptorje kot agonisti ali kot antagonisti (7,8). Danes raziskave kažejo, da ti delujejo preko jedrnih receptorjev, nejedrnih steroidnih receptorjev (npr. membranski estrogenski receptor), nesteroidnih receptorjev (serotoninski, dopaminski, noradrenalinski), receptorjev sirot ter prek encimskih poti za sintezo ali razgradnjo hormonov ter njihov transport (8).

Hormonski motilci zajemajo različne naravne snovi (fitoestrogeni, toksini, naravni hormoni sproščeni iz živali) in širok spekter sintezno pridobljenih, ki so sestavine industrijskih izdelkov (4). Tako se nahajajo v veliko izdelkih, kot so plastenke, posode, obloge pločevink, detergenti, zaviralci gorenja, hrana, igrače, kozmetika in pesticidi (9). Glede na to, da te snovi uporabljamo vsak dan, smo tudi vsak dan, v nizkih odmerkih, preko različnih načinov izpostavljeni velikemu številu hormonskih motilcev (10). Izpostavljeni smo jim lahko neposredno (preko hrane in vode) ali posredno (onesnaženost v zaprtih prostorih, okolijska, kmetijska onesnaženost ter onesnaženje na delovnem mestu) (4). Do učinka hormonskih motilcev na biološke funkcije lahko pride že pri nizkih odmerkih (10).

Hormonski motilci predstavljajo največje tveganje v času pred rojstvom in zgodnji poporodni dobi (9). Njihovo kopičenje v plodu in zgodnjem otroštvu lahko privede do trajnih učinkov, saj je tkivo, ki se razvija, bolj občutljivo na delovanje hormonov in s tem tudi na hormonske motilce (7). Ti učinki lahko postanejo vidni šele desetletja kasneje in lahko povzročijo neplodnost, nastanek raka, moteno delovanje ščitnice, kognitivne in vedenjske motnje, debelost, presnovni sindrom, sladkorno bolezen tipa I in nepravilno delovanje imunskega sistema (10).

Primer hormonskih motilcev so parabeni (estri p-hidroksibenzojske kisline), ki so eni najpogosteje uporabljenih konzervansov v kozmetičnih in farmacevtskih izdelkih ter izdelkih

za osebno nego in živilih zaradi svojih baktericidnih in fungicidnih lastnosti (4,7,10). Tudi nekatere učinkovine, ki absorbirajo UV-svetlobo in se nahajajo v izdelkih za sončenje kot UV filtri, izkazujejo estrogenske učinke (4). Nekatere obstojne organoklorove snovi, kot so pesticid dikloro-difenil-trikloroetan (DDT) in poliklorirani bifenili (PCB), imajo prav tako šibko hormonsko dejavnost (5). Bisfenol A (BPA), ki je dokazano hormonski motilec, se veliko uporablja pri proizvodnji različnih smol in plastike. Di(2-etilheksil)ftalat (DEHP), ki signifikantno vpliva na androgeni hormonski sistem, se je veliko uporabljal pri izdelavi embalaže za živila in je sedaj prepovedan prav zaradi tovrstnih učinkov. Fitoestrogeni so naravno prisotne snovi v rastlinah, ki imajo hormonom podobno delovanje (9). Obstaja še veliko ostalih spojin, ki vplivajo na endokrini sistem človeka in nekatere med njimi so prepovedane, njihovi ostanki pa so še zmeraj prisotni v okolju (5).

### 1.3 Jedrni receptorji

Jedrni receptorji so razred beljakovin, ki jih najdemo v citoplazmi ali jedru celic in preko njih hormoni posredujejo signale tarčnim celicam (4). So z ligandom aktivirani transkripcijski faktorji. Po vezavi liganda pride do konformacijske spremembe, ki aktivira niz dogodkov, ki vodijo do transkripcijske dejavnosti ali represije tarčnih genov (11). Druga skupina jedrnih receptorjev so tako imenovani receptorji sirote, za katere endogeni ligandi niso znani ali ne obstajajo (»true orphans«) ali so bili pred kratkim odkriti (»adopted (posvojeni) orphans«). Jedrni receptorji igrajo glavno vlogo pri razvoju, metabolizmu in fiziologiji osebkov in zato je nepravilno moduliranje aktivnosti teh receptorjev povezano z razvojem različnih bolezni. Zaradi tega so postali tudi tarče posameznih zdravil (12).

Glede na sekvenčno homologijo in filogenetsko drevo se jedrni receptorji razvrstijo v 6 skupin (12):

Skupina 1: TR, RAR, VDR, PPAR, ROR, PXR, LXR, CAR, Rev-erb in ostale.

Skupina 2: RXR, COUP-TF in HNF-4.

Skupina 3: sestavljajo steroidni receptorji: ER, GR, PR, AR, in ERR

Skupina 4: receptor za živčni rastni faktor in receptorji sirote (NGFI-B, NURR1, NOR1).

Skupina 5: receptor za steroidogeni faktor 1 in *Drosophila* jedrni receptor FTZ-F1.

Skupina 6: vsebuje samo GCNF1 receptor, ki se strukturno ne ujema z nobeno drugo skupino.

V nadaljevanju predstavljamo osnovno strukturo jedrnih receptorjev, ki so vsi sestavljeni iz 5 osnovnih domen (4):

1. N-terminalna domena (v nadaljevanju: NTD) ima aktivacijsko funkcijo. Med posameznimi skupinami receptorjev je najbolj variabilna domena, tako v velikosti kot tudi v aminokislinski sestavi. 3D struktura te domene še ni znana, predpostavlja pa se, da ima neorganizirano fleksibilno strukturo, kar ovira njeno kristalizacijo. Za večino N-terminalnih domen je bila ugotovljena trans-aktivacijska funkcija AF-1. AF-1 poddomene nimajo strukturne homologije in se v različnih NTD nahajajo na različnih položajih (11). Delovanje NTD je neodvisno od liganda (4).
2. DNA vezoča C-domena je najbolj ohranjena med posameznimi skupinami receptorjev (4,11). Sestavljena je iz dveh cinkovih prstov, dveh  $\alpha$ -vijačnic in karboksilne skupine (11,12). N-terminalni cinkov del vsebuje 3 aminokisliline, označene kot P-box, ki omogočajo specifično vezavo na DNA. C-terminalni cinkov del vsebuje D-box, ki je vmesnik za dimerizacijo (11). Odvisno od vrste receptorja igra pomembno vlogo pri prepoznavanju zaporedja DNA in/ali dimerizaciji. 3D struktura te domene je znana (12).
3. Gibljiva regija, D-domena, je med posameznimi skupinami receptorjev slabo ohranjena in služi kot zgib, saj tvori upogibljivo vez med DNA vezočo domeno in ligand vezočo domeno in tako omogoča vrtenje ter spremembo konformacije (11,12).
4. Ligand vezoča E-domena (v nadaljevanju: LBD) je tudi ohranjena, vendar manj kot DNA vezoča domena (4,12). Ligand vezoči žep vsebuje veliko število aminokislinskih ostankov, ki se spreminja glede na strukturo receptorjev. Poleg vezave liganda je LBD vključena v homo- ali heterodimerizacijo (11). Vsebuje 4 strukturno različne, vendar funkcionalno povezane površine. To so dimerizacijska površina, ligand-vezoči žep, koregulacijska površina in aktivacijska funkcijska vijačnica (12). Deluje po principu ključavnice, saj je za aktivacijo potrebna vezava določenega liganda (11). Trenutno so določene LBD vseh klasičnih jedrnih receptorjev (s poznanim ligandom) in »adopted« receptorjev sirot (12).
5. Določeni jedrni receptorji lahko vsebujejo zelo spremenljivo F-domeno (4).



Jedrni receptor se veže na sekvenčno specifični promotor za tarčne gene ali kot monomer, ali kot homodimer, ali kot heterodimer, pogosto z retinoidnim X receptorjem. Selektivnost je določena s specifično prepoznavo kemične strukture liganda (4,12). Kljub temu je večina jedrnih receptorjev promiskuitetna, kar je dokazano z delovanjem hormonskih motilcev na jedrne receptorje (12).

V nadaljevanju navajamo lastnosti, nahajanje v tkivih, boleznih oz. posledice moduliranja posameznega tovrstnega receptorskega sistema, še posebno tistih, ki so najpogosteje tarče hormonskih motilcev.

### **1.3.1 Androgeni receptor**

Androgeni receptor (v nadaljevanju: AR) pripada skupini steroidnih receptorjev (11). Pri sesalcih obstaja le ena vrsta AR, medtem ko imajo nekatere živalske vrste dva različna podtipa AR z različnimi karakteristikami (4). Kot drugi jedrni receptorji je sestavljen iz treh glavnih funkcionalnih domen: spremenljive N-terminalne domene, visoko ohranjene DNA vezoče domene in ohranjene ligand vezoče domene (13). Malo je znano o hidrofobnih ostankih, ki tvorijo veliki del ligand-vežočega žepa. Najverjetneje je, da so bistvenega pomena, ne le pri stabilnosti vezave liganda (androgena) v žepu, ampak tudi pri selektivnosti in specifičnosti. Po vezavi androgena na ligand-vežočo domeno se AR hitro premakne v jedro in uravnava transkripcijo ciljnih genov (11,13). S tem mehanizmom androgeni, kot sta testosteron in 5 $\alpha$ -dihidrotestosteron, urejajo fiziološke odzive (razvoj, rast in vzdrževanje normalne funkcije prostate). Do danes poznamo več kristalnih struktur androgenih receptorjev v kompleksu z naravnim androgenom dihidrotestosteronom in kemičnimi steroidi (13).

Visoka koncentracija AR se nahaja v moških tkivih, kot je uro-genitalni trakt, vključno s prostato. Nizke koncentracije AR se nahajajo tudi v številnih drugih tkivih, kot so mlečne žleze, ledvice, jetra, možgani, genitalni fibroblasti, keratinociti v koži, lasni mešički, srčna in skeletne mišice in žlezah slinavke (11). Androgeni receptorji imajo pomembno vlogo pri razvoju sekundarnih spolnih znakov, ključni pa so tudi pri nastanku in napredovanju raka prostate (14). Močno vplivajo na razvoj moškega fenotipa, moško plodnost in njihovo spolno vedenje (11). Pomembno vlogo imajo tudi pri delovanju imunskega sistema, presnovi in razvoju (4). Poleg naravnih androgenov se AR veže tudi z veliko različnimi sintezniimi

spojinami z različno afiniteto (13). Veliko število kemikalij, uporabljenih v kmetijstvu, je prekurzorjev antiandrogenov. Potencialni vir androgenov so anabolični steroidi, ki se dajejo govedu. Tudi za triklokarban, ki je pogosta sestavina v izdelkih za osebno nego, študije dokazujejo moduliranje AR. V vretenčarjih, kot so ribe, ki so bili izpostavljeni androgenom in estrogenom, je bil dokazan spolni dimorfizem (4).

### **1.3.2 Estrogenski receptor**

Estrogenski receptor (v nadaljevanju: ER) pripada skupini steroidnih receptorjev (11). Pri človeku obstajata dva tipa estrogenskih receptorjev ER $\alpha$  in ER $\beta$  (15). Oba kažeta visoko stopnjo podobnosti v aminokislinski sekvenci (16). Obstaja več izooblik ER $\beta$ , od katerih je ER $\beta$ 1 edini funkcionalen in služi kot »obvezen partner« funkcionalnega dimernega kompleksa, ki se veže na hormonsko odzivni element in sproži proces transkripcije. Nasprotno ER $\beta$ 2, ER $\beta$ 4 in ER $\beta$ 5 ne tvorijo homodimerov in sami nimajo transkripcijske dejavnosti, vendar pa lahko heterodimerizirajo z ER $\beta$ 1. Vsako tkivo in celice imajo edinstven vzorec in razmerje izražanja izooblik (17). ER $\alpha$  se izraža predvsem v maternici, prostati, jajčnikih, modih, kosteh, dojkah, različnih regijah možganov, jetrih in belem maščobnem tkivu. ER $\beta$  je izražen v debelem črevesju, prostati, modih, jajčnikih, kostnem mozgu, žilnem endoteliju in v določenih predelih možganov (16). Karcinom mehurja izraža le ER $\beta$ 5 in je tudi edina izooblika zaznana v placenti. ER $\beta$ 5 je prevladujoča izooblika v večini tkiv, sledi ji pa ER $\beta$ 2. ER $\beta$ 4 je v visokih koncentracijah izražena le v modih. V primerjavi z ostalimi izooblikami je ER $\beta$ 1 izražena v relativno nizkih koncentracijah (17).

Estrogenski receptorji so vključeni v regulacijo rasti in razvoja. Igrajo pomembno vlogo pri boleznih, kot so rak dojke, osteoporoza, kardiovaskularna obolenja in Alzheimerjeva bolezen (14). Aktivacija teh receptorjev vodi do pomembnih celičnih fizioloških učinkov v reproduktivnih in nereproduktivnih organih (15). Glavne estrogene v sesalcih predstavljajo estradiol, estron in estriol. Ti so bistvenega pomena za razvoj, razmnoževanje in splošno zdravje človeka. Študije so pokazale, da obstaja veliko spojin, ki se lahko vežejo na ER in povzročajo določene učinke. Endogeni estrogene (estradiol, estron in estriol) se v farmacevtski industriji uporabljajo kot nadomestna terapija pri menopavzi in zdravljenju neplodnosti in ne štejejo kot estrogenski motilci pri človeku, razen če se bistveno spremenijo fiziološke

vsebnosti ob čezmernem vnosu. Težavo predstavljajo, ko dosežejo površinske vode, kjer vplivajo na vodni svet, ali se kot nečistota pojavijo v prehranskih izdelkih (4).

### **1.3.3 Glukokortikoidni receptor**

Glukokortikoidni receptor (v nadaljevanju: GR) pripada skupini steroidnih receptorjev (18). Čeprav je kodiran z enim genom, je v literaturi vse več podatkov, da obstaja več izooblik GR (19). Podobno kot drugi steroidni receptorji je GR sestavljen iz treh funkcionalnih domen, in sicer N-terminalne domene, DNA vezoče domene in ligand vezoče domene. Čeprav so strukture DNA vezoče in ligand vezoče domene znane, struktura N-terminalne domene in splošna struktura receptorja nista znani (18,19). Do klasičnih učinkov glukokortikoidov in drugih steroidnih receptorjev pride preko regulacije genskega prepisovanja kot pri drugih steroidnih receptorjih (18). Glavni glukokortikoid pri človeku je kortizol, ki se imenuje tudi hidrokortizon (19). Glukokortikoidni receptor je izražen skoraj v vseh tkivih in celicah in je pomemben regulator vsebnosti ogljikovih hidratov, beljakovin in presnove maščob. Glukokortikoidi spodbujajo glukoneogenezo in sintezo glikogena, odpornost na inzulin v perifernih tkivih in inhibicijo adiponektina. Ti procesi v času lakote zaščitijo tkiva, ki so odvisna od glukoze, kot so možgani in srce. Glukokortikoidi imajo močan vpliv tudi na imunski odziv, funkcije centralnega živčnega sistema, prebavil, hematopoetskih organov, ledvic in reproduktivnega sistema ter razvoj pljuč ploda. Že več let so učinkovine, ki delujejo na GR, med najpogostejše predpisovanimi zdravili (19). Med dobro poznanimi hormonskimi motilci GR so ftalati. Možen hormonski motilec v glukokortikoidnem sistemu je tudi BPA, čeprav se o pomenu njegovih učinkov *in vivo* še razpravlja (20).

### **1.3.4 Jetrni X receptor**

Jetrni X receptor (v nadaljevanju: LXR) ima v primerjavi s strukturo klasičnih steroidnih receptorjev dokaj velik ligand vezoči žep (21). LXR obstaja v dveh izooblikah, in sicer  $\alpha$  in  $\beta$  (21-24). LXR $\alpha$ -izooblika je visoko izražena v jetrih, ledvicah, tankem črevesju, maščobnem tkivu in makrofagih. V nizki koncentraciji pa je izražena v mnogih drugih tkivih, medtem ko je  $\beta$ -izooblika izražena vsepovsod (22). LXR $\alpha$  modulira katabolizem holesterola v jetrih,  $\beta$  pa aktivira povratni transport holesterola iz periferije v jetra (21). Obe obliki LXR delujeta kot heterodimer z RXR. LXR/RXR je lahko aktiviran z LXR agonistom ali 9-cis-retinojsko

kislino (specifičen RXR ligand). Sočasna uporaba agonistov tako LXR in RXR izzove odziv, ki je močnejši kot odziv posameznega agonista (22).

LXR so receptorji za oksisterole, derivate oksidirane sterola, ki se kopičijo, ko so zvišane koncentracije holesterola (21). Primeri so 25-hidroksiholesterol, ki je relativno šibek agonist, 27-hidroksiholesterol in 24-hidroksiholesterol, ki je najpogostejši v možganih in se imenuje tudi cerebrosterol (22). Poleg oksisterolov (metaboliti holesterola) sta znana endogena liganda tudi glukoza in glukoza-6-fosfat (23).

LXR so ključni regulatorji metabolizma lipidov in holesterola pri sesalcih (24). Dejstvo je, da so naravni ligandi bolj aktivni kot sintetične različice (21). LXR agonisti urejajo tudi druge metabolične poti, npr. stimulacijo sinteze maščobnih kislin, povečanje občutljivosti na inzulin in spodbujanje izločanja inzulina (22). Nedavno so dokazali, da urejajo kontraktilnost maternice ter da imajo protivnetni učinek (21,24). Primeri hormonskih motilcev, ki delujejo na LXR, so ftalati (npr. mono-2-etilheksil ftalat) (20).

### **1.3.5 S peroksisomskim proliferatorjem aktivirani receptor**

Obstajajo trije tipi s peroksisomskim proliferatorjem aktiviranih receptorjev (v nadaljevanju: PPAR) in sicer PPAR $\alpha$ , PPAR $\beta/\delta$  in PPAR $\gamma$  (4,25). Za razliko od steroidnih receptorjev, ki delujejo kot homodimeri, PPAR zahteva heterodimerizacijo z RXR (4).

PPAR $\alpha$  je močno zastopan v tkivih, ki opravljajo razgradnjo maščobnih kislin, kot so rjavo maščevje, jetra, srce, ledvica, črevesje (4). Glavna naloga PPAR $\alpha$  je urejanje homeostaze energije. V jetrih PPAR $\alpha$  sproži razgradnjo maščobnih kislin, stimulira glukoneogenezo in sintezo ketonskih teles, vključen je tudi v nadzor sestave lipoproteinov. Stimulira sintezo hema in katabolizem holesterola, oslabi vnetne odzive in sodeluje pri kontroli presnove aminokislin in sinteze sečnine. Aktivatorji PPAR $\alpha$  so fibrati (gemfibrozil, klofibrat, fenofibrat), ki se pogosto uporabljajo pri zdravljenju hipertrigliceridemije. Pokazalo se je, da imajo agonisti PPAR $\alpha$  protivnetno delovanje, ki ima vlogo pri zmanjšanju pojavnosti srčno-žilnih dogodkov. PPAR $\alpha$  deluje antagonistično na funkcijo LXR in obratno (25).

PPAR $\beta/\delta$  je najbolj razširjen predvsem v koži, črevesju, placenti, skeletnih mišicah, maščobnem tkivu in možganih (25). Njegovo izražanje je odvisno od obsega celične

diferenciacije in proliferacije (4). Pomemben je za razvoj posteljice in črevesja. Prav tako je vključen v nadzor homeostaze energije, in ima pomembno vlogo pri nadzoru celične proliferacije, diferenciacije in preživetja, ter sodeluje pri popravilu tkiv. PPAR  $\beta/\delta$  agonisti bi se lahko uporabljali pri zdravljenju inzulinske rezistence, dislipidemije in debelosti (25).

PPAR $\gamma$  je izražen v 2 izooblikah. PPAR  $\gamma_2$  se visoko izraža v adipoznem tkivu, medtem ko ima PPAR  $\gamma_1$  širši ekspresijski vzorec. PPAR $\gamma$  je ključen akter pri diferenciaciji maščobnega tkiva in pri ohranjanju posebne funkcije adipocitov, kot sta skladiščenje lipidov v belem maščevju in odvajanje energije v rjavem maščevju (4,25). Enako kot pri PPAR $\alpha$  aktivacija PPAR $\gamma$  omejuje vnetje. Izboljšuje tudi občutljivost na inzulin. Agonisti PPAR $\gamma$ , tiazolidindioni, kot sta pioglitazon in rosiglitazon, imajo antidiabetičen učinek (25).

Primeri hormonskih motilcev, ki delujeta na PPAR, sta organokositrove spojine, ki se pogosto uporabljajo kot fungicidi v kmetijstvu in se nahajajo tudi v zaščitnih sredstvih za ladje in ribiške mreže (4).

### **1.3.6 Retinoidni X receptor $\alpha$**

Retinoidni X receptorji (v nadaljevanju: RXR) so izraženi v treh podtipih, ti pa v številnih izooblikah (RXR $\alpha_{1,2,3}$ ; RXR $\beta_{1,2}$ ; RXR $\gamma_{1,2}$ ) (26). Trije RXR podtipi imajo visoko stopnjo homologije, kar kaže, da imajo skupno tarčno sekvenco in se odzivajo na skupne ligande (27). Struktura LBD je med posameznima izooblikama zelo podobna, kar omejuje pripravo selektivnega liganda za posamezno izoobliko (26). Celotna struktura heterodimera med RXR in njegovim partnerjem se bistveno ne razlikuje od njegovih monomernih oblik (28).

RXR je vsestranski dimerizacijski partner. Spontano ali v odvisnosti od liganda vzpostavi dimerni kompleks s številnimi jedrnimi receptorji, ki imajo različne funkcije. Dimerizacija je nujna za visoko afiniteto vezave na DNA za veliko jedrnih receptorjev. RXR dimere lahko razvrstimo na permisivne in nepermisivne. Jedrni receptorji z visoko afiniteto za ligand so v nepermisivni kategoriji (RAR, TR, VDR) (26). Ne morejo se aktivirati z agonistom RXR, ampak samo z agonistom partnerskega receptorja (29). V nasprotju z njimi so jedrni receptorji z nizko afiniteto (PPAR, FXR, LXR) permisivni (26). Ti se lahko aktivirajo ob prisotnosti posameznih ligandov, RXR in partnerskega receptorja ali skupaj, kar pogojuje sinergistično

aktivacijo. Ta pojav se imenuje podrejenost ali utišanje. Nepermissivni partner tako zavira aktivacijo RXR (29).

RXR $\alpha$  ima kritično vlogo v embrionalnem razvoju, zanemarljivo pa pri hematopoezi odraslih (27). Pomanjkanje RXR $\alpha$  pri fetusu povzroča očesne malformacije (29). Izraža se predvsem v jetrih, pljučih, ledvicah, mišicah, povrhnjici, črevesju in je glavni RXR podtip v koži. RXR $\beta$  je zelo razširjen in ga je mogoče zaznati v skoraj vsakem tkivu (28,29). RXR $\gamma$  se nahaja v možganih, skeletni in srčni mišici. Funkcionalna karakterizacija izooblik do zdaj še ni bila izvedena (28).

Retinoidni X receptorji so vpleteni v različne celične procese, od celične proliferacije do metabolizma maščob. Delujejo v številnih bioloških procesih in je težko natančno oceniti njihovo vlogo. 9-cis izomer retinojske kisline je opredeljen kot ligand *in vitro* (26). RXR selektiven ligand beksaroten (reksinoid) se uporablja pri zdravljenju kožnega T-celičnega limfoma in je vključen v klinične raziskave za zdravljenje raka dojk in pljuč. Poleg uporabe pri zdravljenju raka, reksinoidi v prihodnje obetajo kot sredstva proti debelosti (28).

Kljub številnim študijam RXR ostaja enigmatični jedrni receptor in še vedno ni soglasja glede njegove vloge. Čeprav temeljna vprašanja ostajajo neodgovorjena, je jasno, da so RXR bistveni akterji več poti signalizacije, saj tvorijo veliko heterodimerov, vsak od njih pa ima svojo funkcijo (29). Primer hormonskih motilcev, ki delujejo na RXR, so organokositrove spojine (4).

### **1.3.7 Receptorji za ščitnične hormone**

Receptorji za ščitnične hormone (v nadaljevanju: TR) so člani družine jedrnih receptorjev in vsebujejo enake funkcionalne domene kot ostali jedrni receptorji (NTD, DNA vežoča domeno, gibljivo regijo in LBD) (30). Pri sesalcih poznamo dva tipa TR, in sicer TR $\alpha$  in  $\beta$  (4,31). Oba imata še ustrezne izooblike. TR $\alpha$ 1 oblika je pretežno izražena v možganih, srcu in skeletnih mišicah (31). Ima pomembno vlogo pri delovanju srca in termogenezi (32). V možganih je TR $\alpha$ 1 glavna izooblika pri plodu, vendar se ob rojstvu poveča izražanje TR $\beta$ 1, ki se ohrani skozi odraslo življenjsko dobo (30). TR $\beta$ 1 uravnava delovanje jeter in razvoj sluha. Ima pomembno vlogo pri regulaciji povratne informacije osi hipotalamus-hipofiza-ščitnica (32). Pomembna je tudi za barvni vid (31,32). TR $\beta$ 2 se izraža predvsem v možganih, mrežnici

in notranjem ušesu, medtem ko je TR $\beta$ 3 izražena v ledvicah, jetrih in pljučih (31). Za razliko od jedrnih receptorjev, ki se aktivirajo po vezavi steroidnih hormonov, TR lahko heterodimerizira z RXR in se takšen kompleks veže na DNA v odsotnosti liganda (30). Strukture TR $\alpha$  in TR $\beta$  so si podobne v DNA in ligand vezoči domeni in se najbolj razlikujejo v NTD. Obstaja pa bistvena razlika v LBD, kar omogoča prepoznavanje specifičnih ligandov (31).

TR je bistvenega pomena za normalno rast, razvoj, nevrološko diferenciacijo in regulacijo metabolizma pri sesalcih (31). Regulira transkripcijo genov odzivnih na ščitnične hormone (14). Na splošno velja, da so s T3 aktivirani geni vpleteni v glukoneogenezo, glikogenolizo, lipogenolizo, proliferacijo celic in apoptozo. Medtem ko so geni, ki so utišani s T3, vpleteni v inzulinski prenos signalov, celično imunost, strukturo ekscelularnega matriksa, celično zgradbo, glikozilacijo in mitohondrijsko funkcijo (30).

Glavni ligand TR je 3,5,3'-triiodo-L-tironin (T3). Nastanek T3 je posledica dejodiranja tiroksina (T4), ki ga izloča ščitnica. T3 in T4 učinkujeta tako na zniževanje telesne mase kot tudi na raven holesterola v plazmi. Trenutno ni na voljo veliko TR antagonistov z visoko afiniteto (32). Številne kemikalije, kot so pesticidi, bisfenol A, poliklorirani bifenili, polibromirani difenil etri in težke kovine, povzročajo akutne ali kronične učinke zaradi moduliranja delovanja tiroidnega sistema (4).

### **1.3.8 Ostali jedrni receptorji, za katere so znani bodisi endogeni ali eksogeni ligandi**

Določene so kristalne strukture LBD vseh klasičnih receptorjev in »posvojenih« receptorjev sirot (12). Med njimi so tudi jedrni receptorji, ki so obravnavani v nadaljevanju.

Mineralokortikoidni receptorji (v nadaljevanju: MR) so izraženi v epiteljskih celicah, hipokampusu, nefronih in črevesju (19). Prisotni so tudi v kardiomiocitih in žilnih stanah (33). MR so receptorji za 2 fiziološka liganda, aldosteron in kortizol (19). Aldosteron ima kritično vlogo pri uravnavanju transporta natrija in s tem tudi pri uravnavanju elektrolitov v telesu (19,33). Posledično ima aktivnost MR pomembno vlogo pri urejanju kardiovaskularne homeostaze in lahko vpliva na razvoj bolezni srca (33). Agonisti MR se uporabljajo pri zdravljenju adrenalne insuficience, medtem ko se antagonisti uporabljajo za zdravljenje hipertenzije, srčnega popuščanja in odvečnega izločanja beljakovin z urinom (19).

Progesteron regulira množico bioloških procesov v različnih tkivih (34). Biološko delovanje progesterona je posredovano z dvema izooblikama progesteronskih receptorjev (PR) A in B, ki kažeta različno transkripcijsko aktivnost (35). V nekaterih tkivih je bila ugotovljena tretja izooblika PR PR-C, ki je na N-terminalnem delu krajša od ostalih dveh (34). PR je izražen v ženskem reproduktivnem traktu, mlečnih žlezah, možganih in hipofizi. Poleg pomembnega hormonskega učinka deluje kot prekursor pri sintezi estrogenov, androgenov in adrenokortikalnih steroidov (19). Regulira med drugim celični cikel, razvoj mlečnih žlez, vzdrževanje nosečnosti in vedenje ter ureja presnovo (19,35). Progesteronska signalizacija pogosto konvergira z drugimi hormoni, rastnimi faktorji in citokinsko signalizacijo. Tako estrogen inducira ekspresijo PR in je zato njegov učinek odvisen od estrogena. V nasprotju s tem progesteron zmanjšuje estrogenski učinek v maternici (34).

Za receptor retinojske kisline (v nadaljevanju: RAR) velja, da je njegov najpomembnejši endogeni ligand retinoid vse-trans-retinojska kislina. Obstajajo trije podtipi receptorjev retinojske kisline ( $\alpha$ ,  $\beta$  in  $\gamma$ ), ki izvirajo iz treh različnih genov. Za vsak podtip obstaja več izooblik ( $\alpha 1$ ,  $\alpha 2$ ,  $\gamma$ ,  $\gamma 2$ ,  $\beta 1$ ,  $\beta 2$ ,  $\beta 3$ ,  $\beta 4$ ), ki se razlikujejo v N-terminalni regiji. RAR deluje kot heterodimer z RXR. Retinoidi regulirajo širok spekter pomembnih bioloških procesov, kot so morfogeneza in organogeneza zarodka v vretenčarjih, zastoj celične rasti, diferenciacij ter apoptozo. Povezali so ga s številnimi boleznimi, kot so rak in kožne bolezni (36).

Farnezoidni X receptor (FXR) deluje kot glavni regulator homeostaze žolčnih kislin (21). Aktivira se s široko paleto žolčnih kislin, vključno s holno in henodeoksiholinsko kislino (21,37). Aktivacija FXR inhibira pretvorbo holesterola do žolčnih kislin in proizvodnjo trigliceridov (21). V visoki meri se izraža v jetrih, nadledvični žlezi, črevesju in ledvicah (37).

Receptor za vitamin D (VDR) je visoko specifičen receptor (21). Že dolgo je znano, da je njegov ligand  $1,25(\text{OH})_2$ - vitamin  $\text{D}_3$  (21,37). VDR je povezan s homeostazo kalcija in vpliva na delovanje imunskega sistema. Domnevajo, da VDR ščiti organizem pred strupenimi in rakotvornimi učinki ksenobiotikov v črevesju (21). Regulira tudi različne fiziološke učinke, tako da vpliva na skoraj vse organe in tkiva, kjer je tudi izražen v visokih koncentracijah (37).

Pregnanski X receptor (PXR) se lahko aktivira s številnimi relativno hidrofobnimi organskimi spojinami, kot so antibiotiki, žolčne kisline, steroidni hormoni, v maščobah topni vitamini,



različna zdravila, rastlinske droge in hormonski motilci (21,37). PXR je vpleten v kostno homeostazo, apoptozo pri rakavih celicah in vnetne poti. Regulira transkripcijo encimov in transporterjev, ki sodelujejo pri presnovi in izločajo potencialno škodljive spojine (37).

Konstitutivni androstanski receptor (CAR) je nespecifični receptor in ima sposobnost vezave široke palete ligandov (21,37). Do zdaj niso znani endogeni agonisti, ki direktno aktivirajo CAR v fizioloških poteh. Prva identificirana CAR liganda sta inverzna agonista androstanol in androstenol. Indirektno ga aktivira visoka koncentracija žolčnih kislin in bilirubina. Receptorji CAR in PXR posredujejo kemični obrambni odgovor na potencialno strupene spojine, na način, da povečajo zmogljivost jeter, da jih prebavi (21).

Znani so tudi ligandi jedrnih receptorjev ROR in za estrogenskim podobne receptorje (ERR). ROR ima tri različne izooblike ( $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$ ) (38). Ligandi ROR $\alpha$  so holesterol in holesterilsulfat, ter ROR $\beta$  retinojska kislina, medtem ko za ROR $\gamma$  ligandi niso znani (12). Vendar ni še znano ali dejavnost ROR urejajo ligandi ali je urejena preko drugih signalnih poti (39). ERR se prav tako nahaja v treh izooblikah ( $\alpha$ ,  $\beta$  in  $\gamma$ ) (38). Med njimi spada ERR $\alpha$  v skupino receptorjev sirot, medtem ko so za ERR $\beta$  in  $\gamma$  znani ligandi, dietilstilbestrol in 4-OH tamoxifen (12).

### **1.3.9 Receptorji sirote**

So jedrni receptorji, katerih ligande je treba še opredeliti. Za skoraj polovico jedrnih receptorjev endogeni ligandi še niso bili odkriti. Ko za določeni receptor potrdijo na novo odkriti naravni ligand, se receptor opredeli kot »posvojeni« receptor sirota (38). Med »posvojene« receptorje sirote sodijo receptorji PPAR, LXR in PXR (12), o katerih smo že pisali v prejšnjih poglavjih.

## **1.4. Testni sistemi za ugotavljanje endokrinega delovanja ksenobiotikov**

### **1.4.1 Regulatorne potrebe in perspektive**

Vse večje število državnih in mednarodnih strategij in politik je usmerjeno k obravnavi hormonskih motilcev. Obstajajo državni in mednarodni programi ZDA (Presejalni program hormonskih motilcev), Japonske (Strateški programi za hormonske motilce), Evropske unije in OECD (Testiranje in ocenjevanje motilcev delovanja endokrinega sistema), ki se ukvarjajo s

to problematiko. Evropske unija je opredelila obravnavo hormonskih motilcev za prednostno področje in oblikovala različne strategije reševanja tega vprašanja (40).

#### **1.4.2 Vloga OECD pri razvoju testnih sistemov za ugotavljanje endokrinega delovanja ksenobiotikov**

Organizacija za ekonomsko sodelovanje in razvoj (OECD) vključuje regulatorne agencije, znanstvene skupnosti, kemično industrijo in nevladne organizacije (41). Varovanje zdravja ljudi in okolja pred motilci delovanja endokrinega sistema je trenutno pomembna prednostna naloga regulativnih organov v večini držav OECD (42). V OECD so se osredotočili na pripravo testnih smernic in validacijo specifičnih presejalnih metod za njihovo določanje (41).

Na področju zdravja ljudi se je OECD osredotočila na razvoj *in vivo* presejalnih testov, ki so ustrezno validirani in so naštetih v nadaljevanju: uterotrofni test za določanje estrogenega učinka (TG 440), Hershbergerjev test za določanje androgenega učinka (TG 441) in tako imenovani izboljšani subkutani test (TG 407), ki se uporablja za določanje estrogenega učinka, androgenega učinka in raziskovanje učinkov na ščitnični sistem v okviru splošne toksičnosti spojina (40-42). Medtem ko so uterotrofni in Hershbergerjev test osnovni presejalni testi, ki se ne smejo uporabljati neposredno za oceno tveganja, ima TG407 potencial tako za odkrivanje specifičnih neželenih učinkov povezanih z endokrinim sistemom kot tudi splošne toksičnosti. TG 407 je sposoben zanesljivo zaznati hormonske motilce z močno ali zmerno jakostjo delovanja (41). Metode, ki jih je OECD potrdila, morajo ponujati trdno podlago za ugotavljanje in ocenjevanje varnosti uporabe kemikalij, ki morebiti vplivajo na endokrini sistem. Zato morajo pri izvajanju tovrstnih preiskav upoštevati stroga pravila (41).

#### **1.4.3 Računalniška orodja za napovedovanje možnega endokrinega učinka s pomočjo sidranja**

Računalniških programov za sidranje je danes zelo veliko in jih je vsak dan vse več. V nadaljevanju navajamo nekaj računalniških programov, ki omogočajo, s preprostim vnašanjem struktur (risanje z ustreznim programom ali uporabimo SMILES kode za spojine), napovedovanje afinitete interakcij med proučevano spojino in jedrnim receptorjem. S tem lahko ocenimo možnost endokrinega delovanja oz uvrstitve spojina med hormonske motilce. V nadaljevanju navajamo nekaj takih računalniških orodij:

- Endocrine Disruptome je odprtokoden računalniški program, ki je dostopen na spletni strani <http://endocrinedisruptome.ki.si> in ga bomo natančneje predstavili v poglavju Materiali in metode (43).
- VirtualToxLab je *in silico* orodje za napovedovanje toksičnega potenciala zdravil, kemikalij in naravnih sestavin. Ne vključuje nobenih ADME (adsorpcija, porazdelitev, presnova, izločanje) lastnosti spojine. Virtual ToxLab vsebuje 16 modelov proteinov, za katere je znano ali se sumi, da sprožijo neželene učinke in med katerimi je tudi 10 jedrnih receptorjev (AR, Ahr, ER $\alpha$ , ER $\beta$ , GR, LXR, MR, PPAR $\gamma$ , PR, TR $\alpha$ , TR $\beta$ ). Testirali so več kot 2500 različnih spojin v zvezi z njihovo afiniteto do 16 tarčnih beljakovin (44). Temelji na avtomatiziranem protokolu in izračunava vezalno energijo med molekulami in vezavnim mestom tarče (45).
- Na spletni strani <https://mcule.com/apps/1-click-docking/> se nahaja program »1-Click Docking«, ki ponuja veliko možnosti sidranja na različnih tarčah. Tako se lahko izbere približno 10.000 tarč. Če še vedno ne najdemo svoje tarče, jo lahko naložimo s spletne strani »Protein Data Bank« (46). Za vsak izračun je potrebno na novo nastaviti želeno tarčo in ligand ter začeti sidranje. Obstaja v obliki brezplačnega in naročniškega paketa.
- Obstaja pa tudi veliko plačniških programov, izmed katerih izpostavljamo Glide (47) ter VoteDock (48).

## 2. NAMEN DELA

Živimo v svetu, kjer ljudje zaradi pospešenega tempa življenja in povečanega stresa vse pogosteje zbolevajo zaradi različnih bolezni in zato jemljejo vse več raznovrstnih zdravil. Tudi v okolju so prisotne številne kemikalije, ki večinoma negativno vplivajo na življenje in zdravje ljudi ter živali. Veliko teh snovi povzroča tudi neželjeno delovanje na endokrini sistem človeka, kot tudi drugih višje razvitih organizmov, zato bomo skušali ugotoviti, ali imajo zdravilne učinkovine, registrirane v Republiki Sloveniji, poleg svojega osnovnega terapevtskega delovanja tudi potencial za moduliranje jedrnih, predvsem steroidnih receptorjev. Pri tem bomo uporabljali napovedni računalniški program Endocrine Disruptome, ki je prosto dostopen prek spleta na spletni strani <http://endocrinedisruptome.ki.si/>.

Na podlagi pridobljenih rezultatov bomo skušali potrditi ali ovreči naslednje hipoteze:

1. Med zdravilnimi učinkovinami, registriranimi v Republiki Sloveniji, obstajajo tudi take učinkovine, ki preko vezave na jedrne receptorje izkazujejo farmakološko delovanje, za katere računalniški program Endocrine Disruptome napove visoko afiniteto vezave na proučevane jedrne receptorje.
2. Med zdravilnimi učinkovinami, registriranimi v Republiki Sloveniji, obstajajo tudi take učinkovine, za katere računalniški program Endocrine Disruptome napove visoko afiniteto vezave na jedrne receptorje, ki se terapevtsko ne uporabljajo za moduliranje enega od preizkušanih jedrnih receptorjev.
3. Med zdravilnimi učinkovinami, registriranimi v Republiki Sloveniji, obstajajo tudi take učinkovine, za katere Endocrine Disruptome napove visoko afiniteto vezave vsaj za eno vrsto proučevanih receptorjev, za kar do zdaj še niso objavljene nobene študije in tovrstne interakcije v literaturi še niso bile omenjene.
4. Med zdravilnimi učinkovinami, registriranimi v Republiki Sloveniji, obstajajo tudi take učinkovine, za katere računalniški program Endocrine Disruptome ne napove vezave na noben preizkušan jedrni receptor z visoko afiniteto.
5. Program Endocrine Disruptome ustrezno napoveduje moduliranje delovanja jedrnih receptorjev z zdravilnimi učinkovinami.

### **3. MATERIALI IN METODE**

#### **3.1 Materiali**

Seznam zdravil smo prevzeli iz šifranta Centralne baze zdravil, ki je prosto dostopna prek spleta na spletni strani [http://www.cbz.si/cbz/bazazdr2.nsf/Search/\\$searchForm?SearchView](http://www.cbz.si/cbz/bazazdr2.nsf/Search/$searchForm?SearchView).

##### **3.1.1 Centralna baza zdravil**

Centralna baza zdravil (v nadaljevanju: CBZ) je osrednja nacionalna referenčna zbirka podatkov o zdravilih. Zbirko na podlagi medinstitucionalnega dogovora in zakonsko opredeljenih pristojnosti urejajo Ministrstvo za zdravje Republike Slovenije, Javna agencija Republike Slovenije za zdravila in medicinske pripomočke (JAZMP), Zavod za zdravstveno zavarovanje Slovenije (ZZZS) in Nacionalni inštitut za javno zdravje (49).

CBZ je vključena v številne aplikacije, ki sledijo prometu z zdravili. Podatki se uporabljajo v lekarnah, splošnih in specialističnih ambulantah, v bolnišnicah in veledrogerijah. Uporablja se tudi za obračun zdravstvenih storitev v breme zdravstvenega zavarovanja in za statistično poročanje (49).

Spletno stran CBZ lahko uporabljamo na več različnih načinov. Poleg že vnaprej pripravljenih seznamov zdravil imamo na voljo iskanje na različnih ravneh. Lahko izberemo veljavna, ukinjena, veljavna in ukinjena in vsa razvrščena zdravila. Iščemo lahko preko nacionalne šifre zdravila, poimenovanja zdravila, zdravilne učinkovine ali ATC oznake. Posebej lahko še izberemo previdnostne ukrepe, načine/režime predpisovanja/izdaje, razvrstitev na listo (pozitivna lista; v celoti krito iz obveznega zdravstvenega zavarovanja, vmesna lista z omejitvijo predpisovanja itn.), pravni status in prisotnost na trgu. Poleg šifranta za zdravilne učinkovine vsebuje CBZ še šifrant pomožnih snovi, farmacevtske oblike, ATC oznake, razvrstitev na seznam B, terapevtska skupine in podskupine, imetnike dovoljenja za promet in vrsto postopka, po katerem je zdravilo dobilo dovoljenje za promet.

Namen magistrske naloge je bil raziskati zdravilne učinkovine, ki so podane pod šifrantom zdravilnih učinkovin v Centralni bazi zdravil. Razen učinkovin, ki so imele preveliko molekulsko maso in anorganskih soli, smo z računalniškim programom Endocrine Disruptome pridobili podatke o afiniteti do 12 jedrnih receptorjev za 762 zdravilnih učinkovin.

## 3.2. Metode

Potreba po zanesljivih metodah, ki lahko napovedujejo ali imajo spojine potencial za endokrino delovanje, je vse večja. Za napovedovanje takih motenj je bilo sicer razvitih več različnih metodologij. Večina jih uporablja kvantitativno razmerje med strukturo in aktivnostjo (QSAR). Te metode se uporabljajo za napovedovanje delovanja strukturnih analogov. Manj so uspešne pri napovedovanju endokrinega delovanja novih, strukturno drugačnih spojin. Najbolj poznan mehanizem delovanja spojin, ki povzročajo endokrine motnje, je njihova neposredna vezava na jedrne receptorje, zato se molekulska sidranje uporablja kot pomembno orodje za napovedovanje umeščanja v vezavno mesto endogenega (eksogenega pri receptorjih sirotah) liganda. Zato so na Fakulteti za farmacijo, Univerzi v Ljubljani, razvili novo računalniško orodje za napovedovanje vezave spojin na jedrne receptorje, za katere so poznane kristalne strukture z ligandi in ta računalniški program poimenovali Endocrine Disruptome (50).

### 3.2.1 Endocrine Disruptome

Endocrine disruptome je računalniško spletno orodje, dostopno na naslednji spletni strani <http://endocrinedisruptome.ki.si>. ED deluje na platformi imenovani »Docking interface for Target Systems«, ki omogoča sidranje ene molekule v več različnih tarč (43,50). Molekulska sidranje se izvaja preko AutoDock Vina, ki je odprtokodni program za molekulska sidranje (50,51).

Spojine so sidrane na 16 integriranih in dobro potrjenih kristalnih strukturah 12 različnih človeških jedrnih receptorjev: androgeni receptor,  $\alpha$ - in  $\beta$ -estrogenska receptorja, glukokortikoidni receptor, jetrni X receptor  $\alpha$  in  $\beta$ , s peroksisomskimi proliferatorji aktivirani receptorji  $\alpha$ ,  $\beta/\delta$  in  $\gamma$ , retinoidni X receptor  $\alpha$  in tiroidna receptorja  $\alpha$  in  $\beta$  (43,50). Strukture receptorjev AR, ER $\alpha$ , ER $\beta$  in GR so v agonistični oz. antagonistični obliki, medtem ko so ostali le v agonistični obliki (50).

Hitra napoved verjetnosti vezave spojin na različne jedrne receptorje bi lahko bila v pomoč strokovnjakom pri odločitvi za nadaljnje testiranje takih spojin. Torej je računalniški program Endocrine Disruptome namenjen toksikologom in drugim strokovnjakom kot koristno orodje, ki lahko pomaga sprejemati odločitve za nadaljnje *in vitro* in *in vivo* testiranje (50).

### ***3.2.1.1 Spletni vmesnik***

DoTS je osnovna programska oprema, na kateri Endocrine Disruptome teče. Večinoma je napisan v »Python« programskem jeziku in temelji na »Django okviru« (50). Python je razumljiv, interaktiven, objektno usmerjen programski jezik, ki se uporablja za številne aplikacije (52). Django je prostodostopno spletno ogrodje, ki omogoča enostaven in hitrer razvoj spletnih strani (53).

DoTS uporablja OpenBabel, ki omogoča generiranje 3D struktur iz SMILES kod, optimizacijo energije in pravilno ionizacijo spojin (50).

Za uporabo Endocrine Disruptoma je potreben le sodoben brskalnik, ki podpira HTML5, standardni označevalni jezik, ki se uporablja za ustvarjanje spletnih strani (50,54).

Molekulsko sidranje se izvaja z AutoDock Vina programom, z enakimi parametri in protokoli, ki so bili uporabljeni za validacijo (50).

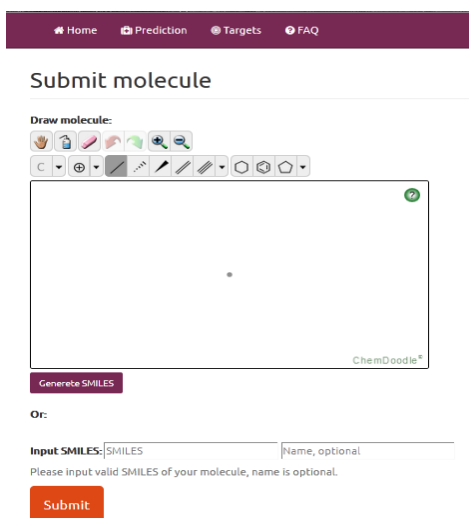
DoTS se lahko uporablja za vsak tarčni sistem in za različne vrste tarč, ne le za jedrne receptorje. Strukture tarč morajo biti validirane in vsi podatki vloženi v sistem, da bo ta deloval pravilno (50).

### ***3.2.1.2 Uporaba programa***

Napovedna stran računalniškega programa Endocrine Disruptome uporabnikom ponuja možnost, da vnesejo strukturo spojine za poskuse sidranja (Slika 1). Lahko so narisane strukture ali se vnese SMILES koda (43,50). SMILES (poenostavljen enovrstični sistem za vstavljanje molekul) je kemijski zapis, ki uporabniku omogoča, da se kemijska struktura predstavlja na način, ki ga prepozna računalniški program. Je enostaven in prilagodljiv opis, ki ima 5 osnovnih pravil, ki jih je treba upoštevati pri zapisu spojine na ta način (55).

Ob vnosu strukture v program Endocrine Disruptome se stran takoj preusmeri na stran za sidranje, ki je dodeljena temu izračunu. DoTS poleg samega sidranja izračuna osnovne fizikalno-kemijske lastnosti vstavljene spojine, kot so molekulska masa, logP, vodikove vezi akceptorjev in donorjev ter opozarja, ali so detektirani PAINS (pan-assay interference structures) (43,50). PAINS so strukturni elementi v molekuli, ki so lahko vzrok za določene neželene interakcije in lahko motijo napovednost, v našem primeru umeščanja spojine na

receptorju. Najpogostejši PAINS so sposobnost za kovinsko keliranje, kemično agregacijo, redoks aktivnost, fluorescenco spojine, oksidacijo cisteina ali promiskuitetno vezavo s proteini. Mnogi PAINS imajo več funkcij, ki povzročajo različne vrste motenj, in imajo za posledico različno *in vitro* in *in vivo* aktivnost (56). Ko program Endocrine Disruptome izvaja izračune sidranja, se stran vsakih 30 sekund samodejno obnovi (43,50). Po navadi se sidranje konča v 5-10 minutah, odvisno od zahtevnosti strukture (43). Program kot rezultat poda tabelo z barvno lestvico (43,50).



The screenshot shows the 'Submit molecule' section of the Endocrine Disruptome web application. At the top, there is a navigation bar with links for Home, Prediction, Targets, and FAQ. Below this, the 'Submit molecule' heading is followed by a 'Draw molecule:' section. This section includes a toolbar with various drawing tools (hand, lasso, line, bond, ring, polygon, etc.) and a large empty canvas for drawing the chemical structure. A 'Generate SMILES' button is located below the canvas. Below the drawing section, there is an 'Or:' section with an 'Input SMILES:' field and a 'Name, optional' field. A note below these fields reads 'Please input valid SMILES of your molecule, name is optional.' A 'Submit' button is positioned at the bottom of this section.

**Slika 1: Napovedna stran računalniškega programa Endocrine Disruptome**

### **3.2.1.3 Ravnanje s podatki**

Program je zasnovan tako, da podatki, ki jih vnese uporabnik, ostanejo shranjeni na spletnem strežniku, vendar niso prosto dostopni vsem (43,50). Vsakemu računu je predložen edinstven in naključen URL (globalni naslov dokumentov in drugih virov na svetovnem spletu), ki je znan le uporabniku, ki je predložil izračun (50). Skrbniki strežnika imajo neomejen dostop do vseh predloženih podatkov, vendar se uporabljajo le za namene iskanja in odstranjevanja napak v programski opremi (43,50).



### **3.2.1.4 Razlaga rezultatov**

Endocrine Disruptome ne upošteva farmakokinetičnih parametrov spojine, kot so bioakumulacija in metabolizem. Napoved daje le za vnešeno strukturo spojine. Treba je tudi upoštevati, da je validacija sidranja izvedena z ligandi, ki imajo veliko afiniteto za vezavo oz. umeščanje na vezavno mesto receptorja (50). AUC (površina pod ROC krivuljo, katere ordinata je občutljivost in abscisa 1 minus specifičnost), ki je posebej podana za vsak receptor, omogoča oceno točnosti celotnega postopka sidranja. Rezultati so barvno kodirani in so razvrščeni v 4 razrede: rdeča, oranžna, rumena in zelena. Za pridobitev ustreznih rezultatov sidranja je bil uporabljen prag občutljivosti (v nadaljevanju: SE). Razred »rdeč« ustreza SE <0,25 in kaže na visoko verjetnost vezave. Obstajata vmesna razreda, »oranžna« (0,25 <SE <0,50) in »rumena« (0,50 <SE <0,75) ter razred »zelen« (SE > 0,75), ki ustreza nizki verjetnostni vezave (43,50). Ligandi, ki jih program uvrsti v skupino z napovedano šibko vezavo na receptor, so kljub vsemu lahko problematični glede učinkov na ta receptorski sistem, še posebej pri kronični izpostavljenosti. Številke podane zraven barvne lestvice označujejo vezavno energijo (50). AUC za uporabljene receptorje znaša: AR= 0,8066; AR<sub>an</sub>= 0,5851; ER<sub>α</sub>= 0,773; ER<sub>αan</sub>= 0,7772; ER<sub>β</sub>= 0,8193; ER<sub>βan</sub>= 0,5997; GR= 0,6208; GR<sub>an</sub>= 0,6268; LXR<sub>α</sub>= 0,7699; LXR<sub>β</sub>= 0,7803; PPAR<sub>α</sub>= 0,8593; PPAR<sub>β</sub>= 0,8539; PPAR<sub>γ</sub>= 0,7927; RXR<sub>α</sub>= 0,796; TR<sub>α</sub>= 0,8232; TR<sub>β</sub>= 0,7997(43).

### **3.2.1.5 Omejitve programa**

Maksimalna molekulska masa spojine, ki jo program lahko sidra, je omejena na 800 daltonov pri vseh receptorjih razen tiroidnih, ker so molekulske mase endogenih ligandov T3 in T4 že tako visoke. Če uporabnik vnese strukturo v obliki soli, program sidra le del soli z večjo molekulsko maso, ker protiioni niso udeleženi v vezavi v aktivno mesto receptorjev in encimov (50). Preizkušana spojina je ionizirana avtomatsko s strani programa, tako da ustreza stanju pri fiziološkem pH 7.4.

Za naslednje spojine, katerih molekulska masa je pod 800 daltonov, program ED ni podal rezultatov kljub večkratnim poskusom: askorbinska kislina, bortezomib, karboplatin, umeklidinij, zidovudin.

### **3.2.2 Iskanje strukture zdravilnih učinkovin**

Strukture zdravilnih učinkovin smo iskali preko treh različnih spletnih strani. Včasih se je zgodilo, da zdravilna učinkovina ni bila prisotna v določeni podatkovni bazi, medtem ko je v drugi bila. Spletni programi so opisani v nadaljevanju. Farmacevtsko-kemijske lastnosti (kot je molekulska masa), za katere smo podatek dobili zraven strukture določene zdravilne učinkovine, so nam pomagale pri preverjanju, ali smo narisali pravilno strukturo v napovedno stran računalniškega programa Endocrine Disruptome. Različne informacije, kot sta mehanizem delovanja in napovedovanje vezave zdravilne učinkovine na posamezen receptor, sta nam pomagala pri razlagi rezultatov.

#### **3.2.2.1 DrugBank**

Baza podatkov DrugBank je bioinformacijski in kemijski informacijski vir, ki združuje podatke o zdravilih (kemijske, farmakološke, farmacevtske) in tarče zdravilnih učinkovin (zaporedje, struktura, način izločanja). Podatkovna baza vsebuje 7759 zdravilnih učinkovin (57). Prosto dostopna je preko spleta, in sicer na spletni strani <http://www.drugbank.ca/> Podatke o zdravilni učinkovini smo iskali preko njenega generičnega imena, ki smo ga pridobili iz seznama zdravilnih učinkovin. Ko enkrat dobimo povezavo do spletne strani, na kateri se nahaja podana učinkovina, poleg IUPAC imena in strukture dobimo podane tudi različne farmakokinetične lastnosti, kratek opis učinkovine in njeno delovanje, SMILES in InChI kode ter sinonime za to spojino. Lahko pridobimo različne toksikološke, farmakološke, ADMET in farmakoekonomske informacije ter fizikalno kemijske lastnosti učinkovine, kot so logP, pKa, itn. Poleg tega lahko razberemo, če so podani različni spektri, reference, interakcije ter tarče, na katere deluje učinkovina (encime, transporterje) in ostale biointerakcije. Pri razlagi rezultatov pridobljenih z računalniškim programom Endocrine Disruptome nam je pomagala DrugBank baza podatkov tudi zato, kerj podaja mehanizem delovanja in primarno tarčo posamezne učinkovine, podaja pa tudi druge tarče posamezne učinkovine. Potrebno je le na strani, ki jo poda, za spojino poiskati ikono »targets«. Izvor podatkov, ki ga uporabljajo v DrugBank bazi za ugotovitev tarč, so zbrani strokovni članki.

#### **3.2.2.2 ChemSpider**

ChemSpider je podatkovna baza, ki omogoča hitro iskanje struktur in lastnosti kemičnih spojin. Omogoča dostop do več kot 34 milijonov struktur s stotinami podatkovnih virov (58).

Prosto dostopna je preko spleta na spletni strani <http://www.chemspider.com>. Spletna stran je urejena na podoben način kot DrugBank. Spojine lahko iščemo preko narisane strukture ali preko imena, sinonimov, blagovne znamke, registracijskega števila (CAS), SMILES kode, InChi (nezaščiten identifikator za kemične snovi, ki se lahko uporablja v tiskanih in elektronskih podatkih in tako omogoča lažje povezovanje različnih skupin podatkov) ali CSID (ChemSpider ID) (59). Za namen magistrske naloge smo strukturo oz. kemično ime učinkovine iskali preko nelastniškega imena, ki smo ga dobili iz seznama zdravilnih učinkovin. Ko enkrat dobimo iskano učinkovino, program ne poda le strukture, ampak tudi imena in identifikacijske oznake in lastnosti ter ponuja dodatna iskanja preko ChemSpider ali Googel spletne strani. Za določene spojine so podani tudi različni spektri. Dobimo lahko seznam ponudnikov spojine, članke in še več informacij o spojini, kot je npr. povezava do Wikipedije, patente ter ostale podatkovne vire.

### **3.2.2.3 ChEMBL**

ChEMBL je podatkovna baza, ki vsebuje podatke o vezavi, funkciji in ADMET informacijah za veliko število bioaktivnih snovi. Ti podatki so pridobljeni iz primarno objavljene literature in potem standardizirani, da bi se povečala njihova kakovost in uporabnost (60).

Podatkovna baza ChEMBL je prosto dostopna na spletni strani <https://www.ebi.ac.uk/chembl/>. Uporabniku ponuja veliko različnih možnosti, kot je iskanje spojin, tarč, testov, člankov in celičnih linij. Razen iskanja preko imena, se lahko išče tudi preko narisane strukture. Vsebuje tudi povezave do različnih drugih strani. Za namen magistrske naloge smo učinkovine iskali preko generičnega imena, ki smo ga dobili iz seznama zdravilnih učinkovin. Poleg strukture lahko pridobimo tudi veliko drugih podatkov, kot so IUPAC ime spojine in klasifikacija (sinonimi, molekularna formula, blagovna imena), predstavitev spojine (SMILES, InChi, itn.), mehanizem njenega delovanja, fizikalno-kemijske lastnosti spojin, klinične podatke, opozorila za strukturne elemente spojine, ki so lahko reaktivni, pregled aktivnosti, testi, tarče spojine, napoved tarč, itn. Pri razlagi rezultatov pridobljenih z računalniškim programom Endocrine Disruptome nam je pomagala ChEMBL baza podatkov, saj podaja tudi predikcijo vezave na tarče, ki niso primarne za to spojino. Potrebno je le na strani, ki jo dobimo ob vpisu spojine v bazo, za spojino poiskati »target prediction«. Metoda je validirana glede na že znane tarčne cilje (v povprečju model pravilno napoveduje v približno 89 % primerov) (61).

### **3.2.3 Preverjanje strukture zdravilnih učinkovin po IUPAC imenu**

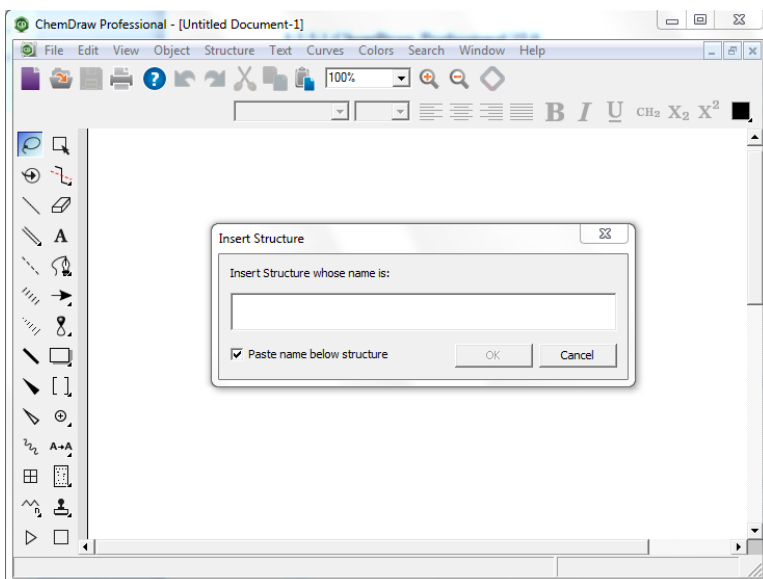
Pri velikem številu zdravilnih učinkovin je treba upoštevati stereoizomerijo. Da bi dobili točno narisano strukturo, smo strukture preverjali s pomočjo kemičnega imena v programu ChemDraw Professional 15.0.

#### ***3.2.3.1 ChemDraw Professional 15.0***

ChemOffice Professional je integrirana zbirka posebnih orodij, ki uporabnikom omogoča shranjevanje, pridobivanje in izmenjavo podatkov ter informacij o spojinah, reakcijah, materialih in njihovih lastnostih. ChemOffice Professional omogoča kemikom in biologom učinkovito spremljati njihovo delo, vizualizacijo in globlje razumevanje njihovih rezultatov in korelacijo biološke aktivnosti s kemičnimi strukturami (62). Vključuje več aplikacij, kot so ChemDraw Professional (risanje kemijske strukture), ChemDraw za Excel, Chem3D (molekularno modeliranje in analiza), ChemFinder (iskanje in informacije integracije), ChemFinder za Office, ChemScript in CDSL Mobile (62,63).

Po zagonu se program lahko takoj uporablja, saj je zelo preprost. Na ikoni »Structure« je potrebno le poiskati »convert name to structure« (Shift+Ctrl+N), potem pa se odpre okence, v katerega vpišemo kemijsko ime določene strukture in nato program poda narisano strukturo. Za namen magistrske naloge smo uporabljali program ChemDraw Professional 15.0, proizvajalca PerkinElmer (Slika 2).

ChemDraw je dobro poznan standardni program za risanje kemijskih struktur in je verjetno najmočnejša kemijska programska oprema na trgu. Uporabniki imajo možnost iskati po strukturi in substrukturi, z uporabo samodejnega reakcijskega mapiranja ter specifičnih atomov in lastnosti vezi (63).



**Slika 2: ChemDraw Professional (verzija 15.0) izvajanje postopka pretvorbe imena zdravilne učinkovine do kemijske strukture.**

### 3.2.4 Razlaga rezultatov

Rezultate pridobljene z računalniškim programom Endocrine Disruptome smo primerjali z že znanimi in pridobljenimi podatki iz podatkovnih baz DrugBank, ChEMBL in PubChem in strokovne literature. DrugBank in ChEMBL podatkovne baze so opisane že prej.

#### 3.2.4.1 PubChem

PubChem baza podatkov je prosto dostopna na spletni strani <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/>. Določene spojine smo iskali preko generičnega imena. Za namen razlage rezultatov smo uporabili podatke o mehanizmu delovanja spojine in rezultate bioloških testov. Da bi prišli do strani, ki podaja podatke o biološki aktivnosti, je potrebno poiskati ikono »bioactivities«, ali na vsebini (»contents«), ki se nahaja na levi strani spletne strani, poiskati »biological test results«. Potem je potrebno poiskati »Refine/Analyze« in potem še »Go to bioactivity analysis tool«. Tako nas pripelje do spletne strani, kjer lahko pridobimo podatke o biološki aktivnosti izbrane spojine. Tam pridobimo podatke o rezultatih (koliko jih je aktivnih, neaktivnih, nedokončnih in nedoločenih), mejnih vrednosti bioaktivnosti (nanomolarnih, mikromolarnih), vrstah bioloških preizkusov (potrditveni,

presejalni testi), najbolj pogoste tarče, kategorije bioloških preizkusov (biokemijski, ki temelji na celicah, mi temelji na organizmih, toksičnost, ADME, *in vitro*, *in vivo*) in tipe biološke aktivnosti (aktivnost, IC50 (polovica maksimalne inhibitorne koncentracije), Ki (vezavna afiniteta liganda), EC50 (polovica maksimalne učinkovite koncentracije), Kd (vezavna afiniteta liganda), in AC50 (polovica aktivne koncentracije)) različnih testov. V PubChem bazi so povzete tudi informacije iz baz DrugBank in ChEMBL.

### 3.2.5 Statistična ocena napovednosti programa

Z uporabo podatkovnih baz in podatkov o interakcijah proučevanih spojin z jedrnimi receptorji, ki smo jih zasledili v člankih, smo skušali oceniti pravilnost napovednosti računalniškega programa Endocrine Disruptome.

Izračun občutljivosti, specifičnosti in točnosti smo izvedli po enačbah, ki so navedene spodaj (64):

$$\text{Točnost} = \frac{\text{pravilno pozitivni} + \text{pravilno negativni}}{\text{pravilno pozitivni} + \text{napačno pozitivni} + \text{pravilno negativni} + \text{napačno negativni}}$$

$$\text{Občutljivost} = \frac{\text{pravilno pozitivni}}{\text{pravilno pozitivni} + \text{napačno negativni}}$$

$$\text{Specifičnost} = \frac{\text{pravilno negativni}}{\text{pravilno negativni} + \text{napačno pozitivni}}$$

Kot pravilno pozitivne smo upoštevali vezave zdravilnih učinkovin na jedrne receptorje, za katere je ED napovedoval vezavo, razvrščeno v razrede, ki napovedujejo vezavo (razred »rdeč«, »oranžen« in »rumen«) in za katere smo pridobili podatke iz baz podatkov in člankov, da se učinkovina veže na te receptorje.

Kot pravilno negativne smo upoštevali vezave zdravilnih učinkovin na jedrne receptorje, za katere je ED napovedoval vezavo, razvrščeno v razred »zelen«, za katere smo pridobili podatke iz baz in člankov, da se učinkovina veže na te receptorje.

Kot napačno pozitivne smo upoštevali vezave zdravilnih učinkovin na jedrne receptorje, za katere je ED napovedoval vezavo, razvrščeno v razrede, ki napovedujejo vezavo (razred »rdeč«, »oranžen« in »rumen«), za katere v bazah podatkov in člankih ni uspelo dokazati vezave na te jedrne receptorje.

Kot napačno negativne smo upoštevali vezave zdravilnih učinkovin na jedrne receptorje, za katere je ED napovedoval vezavo, razvrščeno v razred »zelen«, za katere so v bazah podatkov in člankih dokazali vezavo na te jedrne receptorje.

#### 4. REZULTATI IN RAZPRAVA

Rezultate napovedovanja afinitete vezave na jedrne receptorje za zdravilne učinkovine s programskim orodjem Endocrine Disruptome (v nadaljevanju: ED) smo razvrstili v 3 skupine. V prvo skupino sodijo zdravilne učinkovine, ki preko vezave na jedrne receptorje izkazujejo farmakološko delovanje, kar so potrdile tudi različne študije, in imajo hkrati z ED napovedano vezavo še na kak drug jedrni receptor. V drugo skupino sodijo zdravilne učinkovine, katerih prvotna tarča ni noben med 12-imi obravnavanimi jedrnimi receptorji, vendar pa jih Endocrine Disruptome razvrsti v razred »rdeč« vsaj za en receptorski sistem. V tretjo skupino sodijo zdravilne učinkovine, za katere program ne napove vezave na noben preizkušan jedrni receptor z visoko afiniteto (jih ne razvrsti v razred »rdeč«). Prvi dve skupini sta predstavljeni v nadaljevanju, medtem ko je tretja skupina podana v prilogi 1. Namen magistrske naloge je bil tudi pridobiti spojine, za katere ED napoveduje vezavo na en ali več različnih jedrnih receptorjev, oz. se izkazujejo kot močni modulatorji proučevanega receptorskega sistema, za katere nismo pridobili podatka, da so o tovrstnih učinkih že prej poročali. Tako smo z uporabo ED med zdravilnimi učinkovinami identificirali 70 novih potencialnih spojin z delovanjem na omenjene jedrne receptorje. Uspešnost napovedi afinitete vezave bi lahko potrdili najprej z *in vitro* testi na celičnih linijah, ki imajo ekspresirane posamezne jedrne receptorje ter nadaljevali z bolj kompleksnimi *in vivo* testi.

Podatke za primerjavo rezultatov napovednosti, ki smo jih uporabili pri oceni programa, smo pridobili iz strokovnih člankov in iz baz podatkov, kot so DrugBank, ChEMBL in PubChem, ki so prosto dostopne prek spleta. Izvor podatkov, ki so zbrani v podatkovni bazi DrugBank o vezavi zdravilnih učinkovin na posamezne receptorje, so strokovni članki. ChEMBL omogoča napovedovanje vezave na posamezne tarče. Pri povzemanju podatkov iz PubChem smo uporabili rezultate bioloških testov, ki so zbrani iz qHTS testov (kvantitativno reševanje visoke zmogljivosti) in različnih študij, ki so objavljeni v člankih. Podrobnosti so opisane v poglavju Materiali in metode.

Vezava zdravilne učinkovine na jedrni receptor, ki jo program ED razvrsti v razred »rdeč«, kaže na visoko verjetnost vezave, razred »zelen« ustreza nizki verjetnostni vezavi, medtem ko sta »rumen« in »oranžen« vmesna razreda glede na afiniteto vezave do jedrnih receptorjev. Pri



zdravilnih učinkovinah, ki imajo farmakološko delovanje povezano z aktiviranjem posameznih jedrnih receptorjev, pričakujemo, da bo napovedni program ED tako vezavo razvrstil v razred »rdeč«, ali v vmesne razrede »oranžen« ali vsaj »rumen«. Kjer farmakološko delovanje zdravilne učinkovine ni povezano z aktivacijo posameznega jedrnega receptorja, pričakujemo, da bo vezava razvrščena v razred »zelen«.

#### **4.1 Ocena napovednosti ED za zdravilne učinkovine, ki preko vezave na jedrne receptorje izkazujejo farmakološko delovanje**

Glede na to, da se spodaj omenjene zdravilne učinkovine uporabljajo za moduliranje posameznih receptorjev, saj je njihova terapevtska tarča ali dobro poznan učinek opisan v študijah, smo pričakovali, da bo ED take vezave razvrstil v razred »rdeč«, ali vmesne razrede »oranžen« in »rumen«.

##### **4.1.1 Zdravilne učinkovine, ki se vežejo na AR (skupina A)**

V Preglednici I so navedene zdravilne učinkovine, ki imajo potrjeno vezavo na AR, oz. se terapevtsko uporabljajo za moduliranje tega receptorskega sistema. Pričakovali smo, da jih bo ED razvrstil v razred z visoko afiniteto vezave na AR ali ARan. Napoved je bila uspešna v primeru testosterona, ciproteron acetata in bikalutamida, saj vezavo teh spojin na AR, oz. ARan., ED razvrsti v razrede, ki napovedujejo vezavo. Medtem pa za enzalutamid ED ni podal pričakovanega rezultata, saj njegovo vezavo na ARan. razvrsti v razred »zelen« (obravnavano v nadaljevanju). Preglednica je sestavljena po ATC klasifikaciji.

#### **Vezava učinkovin iz skupine A na jedrne receptorje, ki jih napoveduje ED in njihova primerjava z že znanimi podatki:**

Za učinkovine, ki smo jih uvrstili v skupino A, smo pridobili veliko podatkov o njihovi interakciji z jedrnimi receptorji, ki smo jih lahko uporabili pri oceni napovednosti programa. Zanimivo je, da ED ni podal nobene interakcije, ki sodi v razred, ki napoveduje visoko možnost interakcije, oz. razred »rdeč«, ki še ni bila objavljena v člankih. V nadaljevanju primerjamo podatke pridobljene z ED z že znanimi podatki o interakcijah učinkovin z jedrnimi receptorji iz literature.

**Testosteron** je AR agonist in se v ta namen uporablja tudi terapevtsko (65). ED pravilno napoveduje tako vezavo, saj jo razvrsti v razred »rdeč«. ChEMBL napoveduje vezavo testosterona na AR, GR, ER $\alpha$  in ER $\beta$  (65). Na osnovi podatkov, pridobljenih iz PubChem baze, lahko sklepamo, da se testosteron veže na AR, ER $\alpha$  in GRan. in, da ne izkazuje nobenih interakcij z ARan., ER $\alpha$ an., GR, PPAR $\beta$ , PPAR $\gamma$  ter TR $\beta$  (66). ED pravilno razvrsti afiniteto testosterona za receptorje AR, ER $\alpha$  (v razrede, ki napovedujejo vezavo) in za receptorje PPAR $\beta$  in PPAR $\gamma$  (ni afinitete- razred »zelen«). Za ostale receptorje, za katere smo pridobili podatke o vezavi iz literature pa napačno napoveduje vezavo.

**Preglednica I: Pridobljeni rezultati vezave (vezalna energija) zdravilnih učinkovin, ki se uporabljajo za moduliranje AR in njihova ATC klasifikacija. V desnem kotu je označeno ali obstajajo še kakšni podatki o vezavi določene zdravilne učinkovine na ta jedrni receptor.** MD-mehanizem delovanja, PC-PubChem, DB-DrugBank, CH-ChEMBL, številka označuje članek (referenca pod to številko); + pravilno napoveduje, - nepravilno napoveduje; če zraven ni oznake, pomeni, da nismo našli podatkov v podatkovnih bazah in strokovnih člankih.

Spojina	Testosteron	Ciproteron acetat	Bikalutamid	Enzalutamid
AR	AR : -10.2 CH+,MD+,PC+	AR : -4.7 68-,PC-	AR : -6.4 71-	AR : 7.0 73+
AR an.	AR an.: -10.1 CH+,PC-	AR an.: -6.7 MD+,PC+	AR an.: -7.1 MD+,PC+	AR an.: 6.2 MD-
ER $\alpha$	ER $\alpha$ : -9.2 CH+,PC+	ER $\alpha$ : -4.5 PC+	ER $\alpha$ : -9.0	ER $\alpha$ : -4.4
ER $\alpha$ an.	ER $\alpha$ an.: -9.7 CH+,PC-	ER $\alpha$ an.: -7.1 PC-	ER $\alpha$ an.: -8.6	ER $\alpha$ an.: -7.1
ER $\beta$	ER $\beta$ : -9.7 CH+	ER $\beta$ : -3.3	ER $\beta$ : -8.8	ER $\beta$ : 7.4
ER $\beta$ an.	ER $\beta$ an.: -10.0 CH+	ER $\beta$ an.: -5.6	ER $\beta$ an.: -8.2	ER $\beta$ an.: -6.5
GR	GR: -9.2 CH+,PC-	GR: -8.2 CH+,PC-	GR: -9.3	GR: -8.4
GR an.	GR an.: -7.7 CH-,PC-	GR an.: -8.5 CH-,81-,PC-	GR an.: -7.4	GR an.: -8.1
LXR $\alpha$	LXR $\alpha$ : -10.5	LXR $\alpha$ : -8.9	LXR $\alpha$ : -10.1	LXR $\alpha$ : -10.8
LXR $\beta$	LXR $\beta$ : -10.7	LXR $\beta$ : -11.2	LXR $\beta$ : -10.7	LXR $\beta$ : -11.2
PPAR $\alpha$	PPAR $\alpha$ : -6.6	PPAR $\alpha$ : -1.5 PC+	PPAR $\alpha$ : -7.9	PPAR $\alpha$ : -8.3
PPAR $\beta$	PPAR $\beta$ : -7.5 PC+	PPAR $\beta$ : -6.6 PC+	PPAR $\beta$ : -9.0	PPAR $\beta$ : -8.2
PPAR $\gamma$	PPAR $\gamma$ : -6.7 PC+	PPAR $\gamma$ : -6.6 PC+	PPAR $\gamma$ : -8.7	PPAR $\gamma$ : -7.7
RXR $\alpha$	RXR $\alpha$ : -8.9	RXR $\alpha$ : -6.0 PC+	RXR $\alpha$ : -10.1	RXR $\alpha$ : -6.7
TR $\alpha$	TR $\alpha$ : -7.6	TR $\alpha$ : -2.6	TR $\alpha$ : -7.7	TR $\alpha$ : -7.3
TR $\beta$	TR $\beta$ : -9.6 PC-	TR $\beta$ : -5.2 PC+	TR $\beta$ : -9.1	TR $\beta$ : -7.6
ATC	G03BA03	G03HA01	L02BB03	L02BB04

**Ciproteron acetat** je AR antagonist, ki ga v te namene uporabljamo tudi terapevtsko (67) in jo ED pravilno napove (razvrstitev v razred »rumen«). ChEMBL podaja podatek, da interagira z GR (67). V študijah *in vitro* so potrdili tudi AR agonistično delovanje (68). PubChem pa navaja, da se ciproteron acetat veže na AR, ARan., ER $\alpha$ an. in GRan., medtem ko niso mogli dokazati interakcij z naslednjimi receptorji ER $\alpha$ , GR, PPAR $\alpha$ , PPAR $\beta$ , PPAR $\gamma$ , RXR $\alpha$  in TR $\beta$  (69). ED pravilno napoveduje vezavo na ARan, ki sodi v razred »rumen« in na ER $\alpha$ , PPAR $\alpha$ ,

PPAR $\beta$ , PPAR $\gamma$ , RXR $\alpha$  in TR $\beta$ , ki sodijo v razred »zelen«. Napačno pa ED napoveduje vezavo na ostale prej omenjene receptorje.

Terapevtska tarča **bikalutamida** je AR in se uporablja kot AR antagonist (70). ED razvrsti možnost vezave za to spojino pravilno (uvrstitev v razred »rumen«). Na LNCaP-abl celični liniji so za bikalutamid potrdili antagonistični učinek, medtem ko so na CV1 celicah ugotovili, da deluje obratno, kot AR agonist (71). Program ED pa vezavo na AR razvrsti v razred »zelen«, kar ni v skladu z rezultati pridobljenimi s testiranjem na CV-1 celičnih linijah.

Terapevtska tarča **enzalutamida** je AR, na katero se veže kot antagonist (72). Vendar pa ED napačno napoveduje njegovo afiniteto vezave do ARan., saj ga razvrsti v razred »zelen«. Učinkovina nima AR agonističnega učinka (73), kar program ED potrди, saj ga razvrsti v razred »zelen«.

#### **4.1.2 Zdravilne učinkovine, ki se vežejo na ER (skupina B)**

V Preglednici II so navedene zdravile učinkovine, ki imajo potrjeno vezavo na ER, oz. se uporabljajo za moduliranje tega receptorskega sistema. Pričakovali smo, da bodo to potrdili tudi rezultati napovedi vezave z ED, ki je bila uspešna v primeru etinilestradiola, estradiola, estriola, klomifena in toremifena. V primerih raloksifena, tamoksifena in fulvestranta ED le delno napoveduje pravilni rezultat (obravnavano v nadaljevanju). Preglednica je sestavljena po ATC klasifikaciji.

#### **Vezava učinkovin iz skupine B na jedrne receptorje, ki jih napoveduje ED in njihova primerjava z že znanimi podatki:**

Za **etinilestradiol**, ki se terapevtsko uporablja kot ER $\alpha$  agonist (74), ED pravilno napoveduje vezavo na ER $\alpha$ , saj jo razvrsti v razred »rumen«. ChEMBL napoveduje vezavo na AR, ER $\beta$  in GR (74). Z našimi rezultati se tako ne ujema le vezava na ER $\beta$ , ki je razvrščena v razred »zelen«. Možnost interakcije za ostala dva receptorja (AR in GR) se ujema s ChEMBL rezultati, saj ju ED razvrsti v razreda, ki napovedujeta vezavo. Študije kažejo, da ima etinilestradiol antagonistično delovanje na GR (75), kar se tudi ujema z našimi rezultati, saj je razvrščen v razred »rumen«. PubChem pa navaja, da se etinilestradiol veže na AR, ARan. in

ER $\alpha$  (76), kar potrjujejo tudi rezultati, pridobljeni z ED. Ni pa podatkov, da bi etinilestradiol interagiriral z naslednjimi receptorji PPAR $\alpha$ , PPAR $\beta$ , PPAR $\gamma$ , RXR $\alpha$  (76), kar napove pravilno tudi ED (razvrsti v razred »zelen«), ter z ER $\beta$  in TR $\beta$ , za katere pa ED ne potrjuje verjetnost vezave, saj jo razvrsti v razred »rumen«.

Za **estradiol**, ki se terapevtsko uporablja kot ER $\alpha$  in ER $\beta$  agonist (77), ED pravilno napoveduje vezavo na ER $\alpha$ , saj jo razvrsti v razred »rdeč«. ChEMBL napoveduje vezavo estradiola na AR, ER $\alpha$ , ER $\beta$  in GR, kar je skladno z rezultati pridobljenimi z ED (78). PubChem pa navaja, da se estradiol veže tudi na AR, ARan., ER $\alpha$ , ER $\alpha$ an., ER $\beta$ , ER $\beta$ an. in GRan. (77), kar je skladno z rezultati pridobljenimi z ED, saj so razvrščeni v razrede, ki napovedujejo vezavo. Ni potrjena vezava na receptorje PPAR $\alpha$ , PPAR $\beta$ , RXR $\alpha$  in TR $\beta$  (77), za katere ED v razred »zelen« pravilno razvrsti vse, razen TR $\beta$ , za katerega napove možno interakcijo (razred »rumen«).

**Estriol** se uporablja kot hormonska nadomestna terapija, saj se veže na ER $\alpha$  in ER $\beta$  kot agonist (79,80), kar ED pravilno razvrsti v razrede, ki napovedujejo vezavo. ChEMBL napoveduje vezavo estriola na AR, ER $\alpha$ , ER $\beta$  in GR (80), kar je skladno z rezultati pridobljenimi z ED. PubChem pa navaja, da se estriol veže na ARan., ER $\beta$  in GRan. (79), kar je skladno z razvrstitvijo v afinitetne razrede, ki jo napove ED. Medtem pa PubChem navaja, da se estriol ne veže na PPAR $\beta$ , PPAR $\gamma$  in RXR $\alpha$  (79), ki jih ED pravilno razvrsti v razred »zelen«, in na GR in TR $\beta$ , ki jih ED napačno razvrsti v razred »rumen«.

**Klomifen** se veže na oba ER podtipa v agonistični in antagonistični obliki, v odvisnosti od tarčnega tkiva (81,82). ED pravilno napove možnost vezave za ER $\alpha$ , ER $\alpha$ an. in ER $\beta$ an., medtem ko napačno razvrsti vezavo na ER $\beta$  v razred »zelen«.

**Raloksifen** se terapevtsko uporablja kot ER $\alpha$  in ER $\beta$  agonist (83), kar ED pravilno napove za ER $\alpha$ , medtem pa razvrsti vezavo na ER $\beta$  v razred »zelen«. PubChem navaja, da se raloksifen veže na ARan., ER $\alpha$ , ER $\alpha$ an., ER $\beta$ an. in PPAR $\beta$  (83), kar ED potrjuje, le v primeru ARan. ED napove vezavo razvrščeno v razred »zelen«. PubChem tudi navaja, da se raloksifen ne veže na AR (83), kar ED potrjuje, saj možnost interakcije razvrsti v razred »zelen«.

**Preglednica II: Pridobljeni rezultati vezave (vezalna energija) zdravnih učinkovin, ki se uporabljajo za moduliranje ER in njihova ATC klasifikacija. V desnem kotu je označeno ali obstajajo še kakšni podatki o vezavi določene zdravilne učinkovine na ta jedrni receptor.** MD-mehanizem delovanja, PC-PubChem, DB-DrugBank, CH-ChEMBL in številka označuje članek (referenca pod to številko); + pravilno napoveduje, - nepravilno napoveduje; če zraven ni oznake, pomeni, da ni podatkov v podatkovnih bazah in strokovnih člankih.

Spojina	Etinilestradiol	Estradiol	Estriol	Klomifen	Raloksifen
AR	AR : -8.8 CH+,PC+	AR : -10.7 CH+,PC+	AR : -9.9 CH+	AR : -2.6	AR : 0.5 PC+
AR an.	AR an.: -8.8 CH+,PC+	AR an.: -11.0 CH+,PC+	AR an.: -10.3 CH+,PC+	AR an.: -4.3	AR an.: 1.2 PC-
ER $\alpha$	ER $\alpha$ : -9.6 PC+	ER $\alpha$ : -10.9 MD+,PC+	ER $\alpha$ : -10.3 CH+, MD+	ER $\alpha$ : -9.7 MD+	ER $\alpha$ : -8.9 MD+,PC+
ER $\alpha$ an.	ER $\alpha$ an.: -8.4 MD+,PC+	ER $\alpha$ an.: -10.3 CH+,PC+	ER $\alpha$ an.: -9.7 CH+	ER $\alpha$ an.: -10.1 MD+	ER $\alpha$ an.: -10.2 PC+
ER $\beta$	ER $\beta$ : -8.1 CH+,PC-	ER $\beta$ : -10.4 MD+,PC+	ER $\beta$ : -9.1 CH+,MD+,PC+	ER $\beta$ : -3.0 82-	ER $\beta$ : -1.1 MD-
ER $\beta$ an.	ER $\beta$ an.: -7.6 CH-	ER $\beta$ an.: -10.1 CH+,PC+	ER $\beta$ an.: -9.2 CH+	ER $\beta$ an.: -8.7 82+	ER $\beta$ an.: -10.7 PC+
GR	GR: -9.4 CH+	GR: -9.2 CH+	GR: -9.5 CH+,PC-	GR: -7.6	GR: -8.6
GR an.	GR an.: -7.9 CH+,74+PC+	GR an.: -8.4 CH+,PC+	GR an.: -7.5 CH+,PC+	GR an.: -7.8	GR an.: -9.3
LXR $\alpha$	LXR $\alpha$ : -10.4	LXR $\alpha$ : -10.6	LXR $\alpha$ : -9.6	LXR $\alpha$ : -10.0	LXR $\alpha$ : -10.0
LXR $\beta$	LXR $\beta$ : -10.7	LXR $\beta$ : -10.8	LXR $\beta$ : -10.4	LXR $\beta$ : -8.9	LXR $\beta$ : -11.4
PPAR $\alpha$	PPAR $\alpha$ : -6.4 PC+	PPAR $\alpha$ : -7.1 PC+	PPAR $\alpha$ : -6.9	PPAR $\alpha$ : -7.8	PPAR $\alpha$ : -7.8
PPAR $\beta$	PPAR $\beta$ : -8.6 PC+	PPAR $\beta$ : -8.3 PC+	PPAR $\beta$ : -8.5 PC+	PPAR $\beta$ : -8.6	PPAR $\beta$ : -10.4 PC+
PPAR $\gamma$	PPAR $\gamma$ : -7.5 PC+	PPAR $\gamma$ : -7.5	PPAR $\gamma$ : -7.8 PC+	PPAR $\gamma$ : -9.0	PPAR $\gamma$ : -9.8
RXR $\alpha$	RXR $\alpha$ : -9.7 PC+	RXR $\alpha$ : -9.8 PC+	RXR $\alpha$ : -9.0 PC+	RXR $\alpha$ : -8.6	RXR $\alpha$ : -10.0
TR $\alpha$	TR $\alpha$ : -6.6	TR $\alpha$ : -8.4	TR $\alpha$ : -7.0	TR $\alpha$ : -4.2	TR $\alpha$ : -5.3
TR $\beta$	TR $\beta$ : -8.8 PC-	TR $\beta$ : -9.1 PC-	TR $\beta$ : -9.1 PC-	TR $\beta$ : -6.0	TR $\beta$ : -6.2
ATC	G03CA01 L02AA03	G03CA03	G03CA04 G03CC06	G03GB02	G03XC01

Spojina	Tamoksifen	Toremifen	Fulvestrant
AR	AR : -0.0 PC+	AR : 0.4 87-	AR : -4.8 CH-,PC+
AR an.	AR an.: -4.8 PC-	AR an.: -4.4	AR an.: -3.2 CH-,PC-
ER $\alpha$	ER $\alpha$ : -9.7 MD+,PC+	ER $\alpha$ : -9.1 CH+,MD+	ER $\alpha$ : -8.7 MD-,PC-
ER $\alpha$ an.	ER $\alpha$ an.: -10.1 MD+,PC+	ER $\alpha$ an.: -9.9 CH+,MD+	ER $\alpha$ an.: -9. MD+,PC+
ER $\beta$	ER $\beta$ : -3.5 MD-,PC-	ER $\beta$ : -2.7 CH-	ER $\beta$ : -4.9 MD+,PC+
ER $\beta$ an.	ER $\beta$ an.: -9.4 MD+,PC+	ER $\beta$ an.: -8.6 CH+	ER $\beta$ an.: -8.4 MD+,PC+
GR	GR: -7.3	GR: -6.8	GR: -9.7 PC-
GR an.	GR an.: -8.6 PC+	GR an.: -8.2	GR an.: -8.0 PC+
LXR $\alpha$	LXR $\alpha$ : -9.9	LXR $\alpha$ : -9.7	LXR $\alpha$ : -10.2
LXR $\beta$	LXR $\beta$ : -8.5	LXR $\beta$ : -8.4	LXR $\beta$ : -10.1
PPAR $\alpha$	PPAR $\alpha$ : -8.1	PPAR $\alpha$ : -7.3	PPAR $\alpha$ : -9.0
PPAR $\beta$	PPAR $\beta$ : -8.0 PC-	PPAR $\beta$ : -7.7	PPAR $\beta$ : -9.4 PC+
PPAR $\gamma$	PPAR $\gamma$ : -8.5 PC-	PPAR $\gamma$ : -8.5	PPAR $\gamma$ : -8.4 PC+
RXR $\alpha$	RXR $\alpha$ : -8.8	RXR $\alpha$ : -8.7	RXR $\alpha$ : -9.1 PC+
TR $\alpha$	TR $\alpha$ : -2.5	TR $\alpha$ : -1.8	TR $\alpha$ : -4.9
TR $\beta$	TR $\beta$ : -6.4 PC+	TR $\beta$ : -6.2	TR $\beta$ : -3.8 PC+
ATC	L02BA01	L02BA02	L02BA03

**Tamoksifen** se za terapevtske namene uporablja kot ER $\alpha$  in  $\beta$  agonist in antagonist (84) in interakcije s temi receptorji ED pravilno razvrsti za vse podtipе, razen za ER $\beta$ , ki ga uvrsti v razred »zelen«. Na osnovi podatkov, pridobljenih iz PubChem, lahko sklepamo, da se tamoksifen veže na ER $\alpha$ , ER $\alpha$ an., ER $\beta$ an. in GRan. (84), kar je skladno z napovedjo ED, in na

ARan., ER $\beta$ , PPAR $\beta$  in PPAR $\gamma$  (84), napoved vezave na katere pa ED napačno razvrsti v razred »zelen«. V tej bazi najdemo tudi podatke, da se ta učinkovina ne veže na AR in TR $\beta$  (84), kar ED pravilno razvrsti v razred »zelen«.

**Toremifen** se za terapevtske namene uporablja kot ER $\alpha$  agonist in antagonist (85), kar ED pravilno razvrsti v razrede, ki napovedujejo vezavo. ChEMBL napoveduje vezavo toremifena na ER $\alpha$  in ER $\beta$  (86). V literaturi smo našli podatek, da toremifen pri višjih koncentracijah deluje tudi kot AR agonist (87), s čimer pa se naši rezultati ne ujemajo, saj ED razvrsti verjetnost vezave na AR v razred »zelen«. Ostale ugotovitve iz študij in ChEMBL baze se ujemajo z našimi rezultati za receptorje ER $\alpha$ , ER $\alpha$ an. in ER $\beta$ an., ki so z ED uvrščeni v razrede, ki napovedujejo vezavo. Napoved ED pa se ne ujema z napovedjo vezave na ER $\beta$ , ki ga ED razvrsti v razred »zelen« in tako ne predvidi interakcije s to izoobliko ER.

**Fulvestrant** se terapevtsko uporablja kot ER antagonist in na teh receptorjih ne izkazuje agonističnega učinka (88). ED pravilno razvrsti njegovo možnost interakcije z ER $\alpha$ an., ER $\beta$  in ER $\beta$ an., medtem ko vezavo na ER $\alpha$  razvrsti v razred »rumen«. Tudi iz baze PubChem lahko pridobimo podatke, da se fulvestrant veže na ARan., ER $\alpha$ an., ER $\beta$ an. in GRan. (88), kar ED pravilno razvrsti, razen za ARan., ki sodi v razred »zelen«. PubChem tudi navaja, da se učinkovina ne veže na AR, ER $\alpha$ , ER $\beta$ , GR, PPAR $\beta$ , PPAR $\alpha$ , RXR $\alpha$  in TR $\beta$  (88). Rezultati napovedi ED se za to zadnjo skupino receptorjev skladajo (razvrstitev v razred »zelen«) razen za ER $\alpha$  in GR, za katere ED predvidi šibko interakcijo (razred »rumen«).

#### 4.1.3 Zdravilne učinkovine, ki se vežejo na GR (skupina C)

V Preglednici III so navedene zdravile učinkovine, ki imajo potrjeno vezavo na GR, oz. se uporabljajo za moduliranje tega receptorskega sistema. Za te učinkovine smo pričakovali, da jih bo ED razvrstil v skupino spojin z veliko afiniteto do teh receptorjev (razred »rdeč«). Napoved je bila uspešna v vseh primerih razen beklometazon dipropionata, ciklesonida in alklometazon dipropionata. Preglednica je sestavljena po ATC klasifikaciji.

**Vezava učinkovin iz skupine C na jedrne receptorje, ki jih napoveduje ED in njihova primerjava z že znanimi podatki:**

**Triamcinolon, hidrokortizon in betametazon** se terapevtsko uporabljajo kot GR agonisti (89-91), kar ED pravilno razvrsti v razrede, ki napovedujejo vezavo, v vseh primerih. ChEMBL napoveduje vezavo triamcinolona in betametazona na AR (92,93), kar ER pravilno razvrsti v vseh primerih, razen za vezavo triamcinolona na ARan., saj je le-ta razvrščena v razred »zelen«. PubChem navaja, da se triamcinolon veže na AR, ARan., ER $\alpha$  in GR, medtem ko ni potrditve za vezavo na ER $\alpha$ an., GRan., PPAR $\alpha$ , PPAR $\beta$ , PPAR $\gamma$ , RXR $\alpha$  in TR $\beta$  (89). Podatki, pridobljeni z ED, se ujemajo za jedrne receptorje AR, ER $\alpha$ an., GR, PPAR $\alpha$ , PPAR $\beta$ , PPAR $\gamma$ , RXR $\alpha$  in TR $\beta$ , medtem ko se za ostale receptorje podatki ne ujemajo. PubChem navaja, da se hidrokortizon veže na AR, ER $\alpha$  in GR (90), kar ED potrди za AR in GR, medtem, ko vezavo na ER $\alpha$  razvrsti v razred »zelen«. Podatki iz PubChem baze ne potrđijo vezavo hidrokortizona na ARan., ER $\alpha$ an., GRan., PPAR $\alpha$ , PPAR $\beta$ , PPAR $\gamma$  in TR $\beta$  (90), s čim se ujemajo tudi napovedi z ED za vse receptorje razen za ARan. in GRan., ki sodijo v razred »rumen«. PubChem tudi navaja, da se betametazon veže na AR in GR (91), kar potrđi tudi ED. Medtem se po podatkih iz PubChem baze betametazon ne veže na ARan., ER $\alpha$ , GRan., PPAR $\alpha$ , PPAR $\beta$ , PPAR $\gamma$  in TR $\beta$  (91), kar tudi ED razvrsti v razred »zelen« za vse jedrne receptorje razen ARan. in GRan.

**Flutikazon propionat** se terapevtsko uporablja kot GR agonist (94), kar ED pravilno razvrsti v razred »rumen«. ChEMBL poleg interakcije z GR napoveduje še vezavo flutikazon propionata na AR (94). Imel naj bi šibko AR agonistično delovanje, v odvisnosti od koncentracije pa je izkazal tudi AR antagonističen učinek. Takšno obratno delovanje je bilo doseženo pri koncentracijah, ki so bile več kot 3 velikostne razrede večje od njegovih učinkov na GR (95), kar ED ni zaznal, saj vezavo flutikazon propionata na AR in ARan. razvrsti v razred »zelen«. Vezave na ER v isti študiji niso mogli potrđiti (95). Vezavo na ER podtipe v agonistični in antagonistični obliki tudi ED razvrsti v razred »zelen«.

**Preglednica III: Pridobljeni rezultati vezave (vezalna energija) zdravilnih učinkovin, ki se uporabljajo za moduliranje GR in njihova ATC klasifikacija. V desnem kotu je označeno ali obstajajo še kakšni podatki o vezavi določene zdravilne učinkovine na ta jedrni receptor.** MD-mehanizem delovanja, PC-PubChem, DB-DrugBank, CH-ChEMBL in številka označuje članek (referenca pod to številko); + pravilno napoveduje, - nepravilno napoveduje; če zraven ni oznake, pomeni, da ni podatkov v podatkovnih bazah in strokovnih člankih.

Spojina	Triamcinolon		Deksametazon		Hidrokortizon		Prednizon		Betametazon	
AR	AR : -8.2 CH+,PC+		AR : -8.9 CH+,97-,PC+		AR : -8.3 PC+		AR : -6.4 CH-,PC-		AR : -8.7 CH+,PC+	
AR an.	AR an. : -7.2 CH-,PC-		AR an.: -8.6 CH+,PC-		AR an. : -7.8 PC-		AR an.: -8.7 CH+,PC+		AR an. : -8.2 CH+,PC-	
ER $\alpha$	ER $\alpha$ : -6.0 PC-		ER $\alpha$ : -6.5 113+,PC+		ER $\alpha$ : -6.1 PC-		ER $\alpha$ : -7.6 PC-		ER $\alpha$ : -5.9 PC+	
ER $\alpha$ an.	ER $\alpha$ an.: -7.1 PC+		ER $\alpha$ an.: -7.5 PC+		ER $\alpha$ an.: -6.9 PC+		ER $\alpha$ an.: -7.2 PC+		ER $\alpha$ an.: -7.0	
ER $\beta$	ER $\beta$ : -5.1		ER $\beta$ : -6.5		ER $\beta$ : -5.4		ER $\beta$ : -6.0		ER $\beta$ : -5.2	
ER $\beta$ an.	ER $\beta$ an.: -5.9		ER $\beta$ an.: -5.9		ER $\beta$ an.: -5.4		ER $\beta$ an.: -6.8		ER $\beta$ an.: -6.2	
GR	GR: -9.6 MD+,PC+		GR: -9.4 MD+,PC+		GR: -8.2 MD+,PC+		GR: -8.5 MD+,PC-		GR: -9.8 MD+,PC+	
GR an.	GR an.: -7.9 PC-		GR an.: -8.1 PC-		GR an.: -8.2 PC-		GR an.: -7.5 PC-		GR an.: -8.3 PC-	
LXR $\alpha$	LXR $\alpha$ : -10.5		LXR $\alpha$ : -9.6 117+		LXR $\alpha$ : -9.1		LXR $\alpha$ : -7.2		LXR $\alpha$ : -11.1	
LXR $\beta$	LXR $\beta$ : -10.8		LXR $\beta$ : -10.7 117-		LXR $\beta$ : -10.4		LXR $\beta$ : -8.5		LXR $\beta$ : -11.0	
PPAR $\alpha$	PPAR $\alpha$ : -6.6 PC+		PPAR $\alpha$ : -3.7 PC+		PPAR $\alpha$ : -5.2 PC+		PPAR $\alpha$ : -7.9		PPAR $\alpha$ : -5.5 PC+	
PPAR $\beta$	PPAR $\beta$ : -7.0 PC+		PPAR $\beta$ : -6.6 PC+		PPAR $\beta$ : -7.1 PC+		PPAR $\beta$ : -6.7 PC+		PPAR $\beta$ : -6.9 PC+	
PPAR $\gamma$	PPAR $\gamma$ : -6.5 PC+		PPAR $\gamma$ : -6.2 PC+		PPAR $\gamma$ : -5.9 PC+		PPAR $\gamma$ : -6.4 PC+		PPAR $\gamma$ : -5.9 PC+	
RXR $\alpha$	RXR $\alpha$ : -5.9 PC+		RXR $\alpha$ : -6.9 PC+		RXR $\alpha$ : -7.3		RXR $\alpha$ : -6.0 PC+		RXR $\alpha$ : -6.3	
TR $\alpha$	TR $\alpha$ : -4.4		TR $\alpha$ : -4.0		TR $\alpha$ : -3.1		TR $\alpha$ : -3.8		TR $\alpha$ : -4.9	
TR $\beta$	TR $\beta$ : -5.6 PC+		TR $\beta$ : -6.4 PC+		TR $\beta$ : -6.2 PC+		TR $\beta$ : -7.1 PC+		TR $\beta$ : -7.8 PC+	
ATC	A01AC01 C05AA12 D07AB09 D07XB02	H02AB08 R01AD11 R03BA06 S01BA05	A01AC02 C05AA09 D07AB19 D07XB05 D10AA03 H02AB02	R01AD03 S01BA01 S01CB01 S02BA06 S03BA01	A01AC03 A07EA02 C05AA01 D07AA02 D07XA01	H02AB09 S01BA02 S01CB03 S02BA01	A07EA03 H02AB07	A07EA04 C05AA05 D07AC01 D07XC01 H02AB01 R01AD06	R03BA04 S01BA06 S01CB04 S02BA07 S03BA03	

Spojina	Budezonid		Beklometazon dipropionat		Metilprednizolon		Flutikazon propionat		Mifepriston	
AR	AR : -3.0 CH-		AR : 0.9 CH-,PC-		AR : -5.8 CH-,PC-		AR : -1.9 CH-,95-		AR : 10.0 CH-,PC-,95-	
AR an.	AR an.: -3.2 CH+		AR an.: 1.7 CH-,PC+		AR an.: -8.0 CH+,PC-		AR an.: -1.7 CH-,95-		AR an.: -1.4 CH-,95-,PC-	
ER $\alpha$	ER $\alpha$ : -4.6		ER $\alpha$ : -4.2 PC+		ER $\alpha$ : -6.7 PC+		ER $\alpha$ : -4.3 95+		ER $\alpha$ : -8.3 CH+,PC-	
ER $\alpha$ an.	ER $\alpha$ an.: -7.2		ER $\alpha$ an.: -7.6 PC+		ER $\alpha$ an.: -7.2		ER $\alpha$ an.: -7.2 95+		ER $\alpha$ an.: -7.4 CH-,PC-	
ER $\beta$	ER $\beta$ : 0.4		ER $\beta$ : 2.2		ER $\beta$ : -5.7		ER $\beta$ : 2.3 95+		ER $\beta$ : 4.7 CH-	
ER $\beta$ an.	ER $\beta$ an.: -5.7		ER $\beta$ an.: -6.1		ER $\beta$ an.: -5.6		ER $\beta$ an.: -6.0 95+		ER $\beta$ an.: -8.4 CH+	
GR	GR: -8.6 MD+,PC+		GR: -7.1 MD-,PC-		GR: -8.7 MD+,PC+		GR: -7.6 MD+,PC+		GR: -4.7 PC-	
GR an.	GR an.: -8.2		GR an.: -9.0 PC-		GR an.: -7.7		GR an.: -8.2		GR an.: -8.5 MD+,PC+	
LXR $\alpha$	LXR $\alpha$ : -8.7		LXR $\alpha$ : -7.0		LXR $\alpha$ : -7.0		LXR $\alpha$ : -5.7		LXR $\alpha$ : -8.0	
LXR $\beta$	LXR $\beta$ : -9.0		LXR $\beta$ : -10.0		LXR $\beta$ : -10.2		LXR $\beta$ : -10.1		LXR $\beta$ : -7.5	
PPAR $\alpha$	PPAR $\alpha$ : -6.3		PPAR $\alpha$ : -3.9		PPAR $\alpha$ : -7.1		PPAR $\alpha$ : -4.1		PPAR $\alpha$ : -8.0 PC+	
PPAR $\beta$	PPAR $\beta$ : -6.4		PPAR $\beta$ : -5.5		PPAR $\beta$ : -7.8 PC+		PPAR $\beta$ : -6.7		PPAR $\beta$ : -7.8	
PPAR $\gamma$	PPAR $\gamma$ : -5.6		PPAR $\gamma$ : -5.5		PPAR $\gamma$ : -6.4 PC+		PPAR $\gamma$ : -6.6		PPAR $\gamma$ : -7.9	
RXR $\alpha$	RXR $\alpha$ : -6.2		RXR $\alpha$ : -4.1		RXR $\alpha$ : -6.8 PC+		RXR $\alpha$ : -5.6		RXR $\alpha$ : -5.9	
TR $\alpha$	TR $\alpha$ : -0.2		TR $\alpha$ : 4.6		TR $\alpha$ : -1.3		TR $\alpha$ : -0.6		TR $\alpha$ : 9.7	
TR $\beta$	TR $\beta$ : -4.2		TR $\beta$ : -2.8 PC+		TR $\beta$ : -8.4 PC-		TR $\beta$ : -5.6		TR $\beta$ : 5.8 PC+	
ATC	A07EA06 D07AC09	R01AD05 R03BA02	A07EA07 R01AD01	D07AC15 R03BA01	D07AA01 D10AA02	H02AB04	D07AC17 R01AD08	R03BA05	G03XB01	



Spojina	Flutikazon furoat	Ciklesonid	Loteprednol etabonat	Alklometazon dipropionat	Fluorometolon acetat
AR	AR : 0.6	AR : 17.5 CH-,PC-	AR : -5.6 CH-,PC-	AR : 1.2 CH-,PC-	AR : -6.7 CH-
AR an.	AR an.: -0.2	ARan. : 14.6 CH-,PC+	AR an.: -5.4 CH+,PC-	AR an.: -1.4 CH-,PC+	AR an.: -5.8 CH+
ER $\alpha$	ER $\alpha$ : -5.2	ER $\alpha$ : -5.3 100+,PC+	ER $\alpha$ : -4.8 PC-	ER $\alpha$ : -3.7 PC+	ER $\alpha$ : -4.9
ER $\alpha$ an.	ER $\alpha$ an.: -6.9	ER $\alpha$ an.: -6.9 100+,PC-	ER $\alpha$ an.: -6.5 PC+	ER $\alpha$ an.: -6.5	ER $\alpha$ an.: -6.9
ER $\beta$	ER $\beta$ : 2.4	ER $\beta$ : 18.8 100+	ER $\beta$ : -3.1	ER $\beta$ : -2.3	ER $\beta$ : -4.2
ER $\beta$ an.	ER $\beta$ an.: -7.1	ER $\beta$ an.: -7.1 100+	ER $\beta$ an.: -4.9	ER $\beta$ an.: -5.7	ER $\beta$ an.: -6.1
GR	GR: -8.4 MD+,PC+	GR: -2.4 MD-,PC-	GR: -7.7 MD+,PC+	GR: -6.4 MD-,PC-	GR: -8.6 CH+,MD+
GR an.	GR an.: -8.5	GR an.: -9.4	GR an.: -7.3	GR an.: -6.9	GR an.: -8.3 CH-
LXR $\alpha$	LXR $\alpha$ : -4.5	LXR $\alpha$ : -1.7	LXR $\alpha$ : -7.8	LXR $\alpha$ : -3.8	LXR $\alpha$ : -7.2
LXR $\beta$	LXR $\beta$ : -10.2	LXR $\beta$ : -7.4	LXR $\beta$ : -8.8	LXR $\beta$ : -7.0	LXR $\beta$ : -11.3
PPAR $\alpha$	PPAR $\alpha$ : -2.5	PPAR $\alpha$ : -3.5	PPAR $\alpha$ : -4.3	PPAR $\alpha$ : -3.8	PPAR $\alpha$ : -4.1
PPAR $\beta$	PPAR $\beta$ : -5.9	PPAR $\beta$ : -5.4	PPAR $\beta$ : -5.1 PC+	PPAR $\beta$ : -4.1	PPAR $\beta$ : -6.6
PPAR $\gamma$	PPAR $\gamma$ : -6.6	PPAR $\gamma$ : -7.7 PC+	PPAR $\gamma$ : -5.1 PC+	PPAR $\gamma$ : -5.6 PC+	PPAR $\gamma$ : -7.0
RXR $\alpha$	RXR $\alpha$ : -5.2	RXR $\alpha$ : -3.6	RXR $\alpha$ : -5.1 PC+	RXR $\alpha$ : -1.6	RXR $\alpha$ : -6.8
TR $\alpha$	TR $\alpha$ : 1.3	TR $\alpha$ : 9.4 100+	TR $\alpha$ : -1.2	TR $\alpha$ : 6.7	TR $\alpha$ : -3.9
TR $\beta$	TR $\beta$ : -1.7	TR $\beta$ : 1.0 100+,PC+	TR $\beta$ : -4.8 PC+	TR $\beta$ : 2.6 PC+	TR $\beta$ : -5.9
ATC	R01AD12 R03BA09	R01AD13 R03BA08	S01BA14		

Spojina	Mometazon
AR	AR : -6.6
AR an.	AR an.: -6.8
ER $\alpha$	ER $\alpha$ : -4.5
ER $\alpha$ an.	ER $\alpha$ an.: -7.3
ER $\beta$	ER $\beta$ : -3.8
ER $\beta$ an.	ER $\beta$ an.: -5.9
GR	GR: -9.8 MD+
GR an.	GR an.: -8.7
LXR $\alpha$	LXR $\alpha$ : -9.9
LXR $\beta$	LXR $\beta$ : -10.4
PPAR $\alpha$	PPAR $\alpha$ : -5.0
PPAR $\beta$	PPAR $\beta$ : -6.6
PPAR $\gamma$	PPAR $\gamma$ : -5.7
RXR $\alpha$	RXR $\alpha$ : -5.6
TR $\alpha$	TR $\alpha$ : -3.4
TR $\beta$	TR $\beta$ : -6.4
ATC	

**Mifepriston** se terapevtsko uporablja kot GR antagonist (96), kar ED pravilno razvrsti v razred »rumen«. ChEMBL napoveduje vezavo na AR, ER $\alpha$  in ER $\beta$  (96), kar ED potrdi le za ER $\alpha$  in ER $\beta$ an. Mifepriston deluje kot močan antiandrogen z minimalno agonistično aktivnostjo (97), kar se ne ujema z našimi rezultati, saj njegovo vezavo ED na AR in ARan. razvrsti v razred »zelen«. PubChem podaja podatek, da se veže na AR, ARan., ER $\alpha$ an., GR in GRan., medtem ko ne interagira s PPAR $\alpha$  in TR $\beta$  (98). To se delno ujema z rezultati ED, saj jakost interakcije z ER $\alpha$ , ER $\beta$ an. in GRan. razvrsti v razred »rumen«, pri ostalih jedrnih receptorjih pa vezave ne napove (razred »zelen«).

**Ciklesonid** se terapevtsko uporablja kot GR agonist (99), kar ED napačno razvrsti v razred »zelen«. ChEMBL napoveduje vezavo na AR (99), ki je pri naših rezultatih razvrščena v

razred »zelen« in se tako rezultati ne ujemajo. Študija Belvisi in sodelavcev pravi, da se ciklesonid ne veže na ER in TR (100), kar se ujema tudi z našimi rezultati, saj vezavo nanje ED razvrsti v razred »zelen«. PubChem navaja, da se ciklesonid veže na AR, ER $\alpha$ an. in GR, medtem ko ni potrditve za vezavo na ARan., ER $\alpha$ , PPAR $\gamma$  in TR $\beta$  (101). ED vse te vezave razvrsti v razred »zelen«. Rezultati iz študije in PubChem se razlikujejo pri oceni verjetnosti za vezavo na ER $\alpha$ an., saj so pri študiji uporabili metodo vezave radioliganda, medtem ko PubChem podaja podatek iz študije visoko zmogljivostnega reševanja (qHTS) (102).

Za **metilprednizolon, flutikazon furoat, fluorometolon acetat, mometazon in budezonid**, ki se terapevtsko uporabljajo kot GR agonisti (103-107), ED pravilno napove vezavo. ChEMBL poleg interakcije z GR predpostavi še vezavo metilprednizolona na AR (103), kar ED potrди za ARan. Poleg vezave na GR, ChEMBL napoveduje vezavo fluorometolon acetata na AR (105), kar ED potrди za vezavo na GR in ARan. ChEMBL tudi napoveduje vezavo budezonida na AR (107), kar ED potrди za ARan.

Za spojine: **alklometazon dipropionat, beklometazon dipropionat, loteprednol etabonat in prednizon**, ki se terapevtsko uporabljajo kot GR agonisti (108-111), ED v razred »rumen« pravilno razvrsti vezavo loteprednol etabonata in prednizona na GR, medtem ko vezavo alklometazon propionata in beklometazon propionata na GR razvrsti v razred »zelen«. ChEMBL v vseh primerih podaja vezavo na AR (108-111), kar ED potrди za vezavo loteprednol etabonata in prednizona na ARan. Na osnovi podatkov, pridobljenih iz PubChem, lahko sklepamo, da se alklometazon dipropionat veže na AR in GR, medtem ko vezave na ARan., ER $\alpha$ , PPAR $\gamma$  in TR $\gamma$  ne potrđijo (112). ED vse interakcije s temi receptorji razvrsti v razred »zelen«. PubChem navaja, da se beklometazon dipropionat veže na AR in GR, medtem ko vezavo na ARan., ER $\alpha$ , ER $\alpha$ an., GRan. in TR $\beta$  ne potrđi (113). ED pa vse omenjene vezave, razen GRan. (sodi v razred »rumen«), razvrsti v razred z nizko možnostjo vezave. Tudi iz baze PubChem lahko pridobimo podatke, da se loteprednol etabonat veže na AR, ER $\alpha$  in GRan. (114), kar ED potrđi le v primeru GR. PubChem tudi navaja, da se loteprednol etabonat ne veže na ARan., ER $\alpha$ an., PPAR $\beta$ , PPAR $\gamma$ , RXR $\alpha$  in TR $\beta$  (114), kar ED potrđi v vseh primerih razen vezave na ARan., ki jo razvrsti v razred »rumen«. PubChem tudi navaja, da se prednizon veže na AR, ARan., ER $\alpha$  in GRan., medtem ne potrđi vezavo na ER $\alpha$ an., GR,

PPAR $\beta$ , PPAR $\gamma$ , RXR $\alpha$  in TR $\beta$  (115). ED pa za učinkovino prednizon v razred »zelen« razvrsti vse vezave razen na ARan (sodi v razred »rdeč«) in GR (sodi v razred »rumen«).

**Deksametazon** se terapevtsko uporablja kot GR agonist (116), kar ED pravilno razvrsti v razred »rumen«. ChEMBL poleg interakcije z GR napoveduje še vezavo na AR (116). V literaturi smo v eni izmed študij zasledili, da deksametazon ne izkazuje aktivnosti na AR pri koncentracijah do 1 $\mu$ M (97). ED pa vezavo na AR in ARan. razvrsti v razred »rdeč«, kar se torej ujema z rezultati ChEMBL baze, ampak ne tudi z rezultati omenjene študije. *In silico* raziskava napoveduje, da deksametazon ne interagira z LXR $\alpha$ , LXR $\beta$  in ER $\alpha$  (117), kar se ujema z napovedmi ED za LXR $\alpha$  in ER $\alpha$ . PubChem podaja podatek, da se deksametazon veže na ARan., medtem ko ne interagira z nobenim od naslednjih receptorjev oz. njihovih oblik v agonističnem oz. antagonističnem stanju: TR $\beta$ , RXR $\alpha$ , PPAR $\alpha$ , PPAR $\gamma$ , PPAR $\beta$ , GRan., ER $\alpha$ , ER $\alpha$ an.in ARan (118). Napoved ED se ujema s podatki PubChem baze za receptorje AR, ER $\alpha$ , ER $\alpha$ an., GR, PPAR $\alpha$ , PPAR $\beta$ , PPAR $\gamma$ , RXR $\alpha$  in TR $\beta$ , medtem ko interakcije z ARan. in GRan. oceni drugače.

#### **4.1.4. Zdravilne učinkovine, ki se vežejo na PPAR (skupina D)**

V Preglednici IV so navedene zdravile učinkovine, ki imajo potrjeno vezavo na PPAR in njegove podtipe, oz. se uporabljajo za moduliranje tega receptorskega sistema. Pričakovali smo zato, da bodo vezave omenjenih spojin na PPAR, oziroma na njegove podtipe, razporejene v razred od rumenega do rdečega. Napoved ni bila pravilna v nobenem od treh primerov, saj ED vezavo fenofibrata, gemfibrozila in pioglitazona na PPAR podtipe razvrsti v razred z nizko možnostjo vezave, oz. razred »zelen«. Preglednica učinkovin je sestavljena po ATC klasifikaciji.

#### **Vezava učinkovin iz skupine D na jedrne receptorje, ki jih napoveduje ED in njihova primerjava z že znanimi podatki:**

**Fenofibrat** in **gemfibrozil** se v terapevtske namene uporabljata kot PPAR $\alpha$  agonista (119,120), kar ED napačno razvrsti v razred »zelen«. ChEMBL za obe učinkovini napoveduje vezavo na PPAR $\beta$  in PPAR $\beta$  (119,120), kar ED ne potrdi, saj v primerih obeh spojin te vezave

razvrsti v razred »zelen«. Na osnovi podatkov, pridobljenih iz PubChem baze, lahko sklepamo, da se fenofibrat veže na ARan. in ER $\alpha$ an. in da ne izkazuje nobenih interakcij z AR, ER $\alpha$ , GR, GRan., PPAR $\beta$ , PPAR $\gamma$ , RXR $\alpha$  ter TR $\beta$  (121). ED pravilno razvrsti afiniteto fenofibrata za receptorje AR, ER $\alpha$ , PPAR $\beta$ , PPAR $\gamma$  in RXR $\alpha$  (ni afinitete-razred »zelen«). Za ostale receptorje, za katere smo pridobili podatke o vezavi iz literature pa napačno napoveduje vezavo. PubChem tudi navaja, da se gemfibrozil veže na PPAR $\alpha$  (122), kar ED napačno razvrsti v razred »zelen«. Medtem ko se po podatkih iz te baze ne veže na AR, ARan., ER $\alpha$ , ER $\alpha$ an., GR, GRan., PPAR $\beta$ , PPAR $\gamma$ , RXR $\alpha$  in TR $\beta$  (122), kar potrди tudi ED.

**Pioglitazon** se terapevtsko uporablja kot PPAR $\gamma$  agonist (123), kar ED napačno razvrsti v razred »zelen«. ChEMBL napoveduje vezavo pioglitazona na PPAR $\alpha$  (123), medtem ko ED za ta podtip, PPAR $\alpha$ , razvrsti verjetnost vezave v razred »zelen«. Za pioglitazon so ugotovili, da je delni GR agonist (124), kar se ujema tudi z napovedmi ED, ki je afiniteto vezave na GR razvrstil v razred »rumen«.

**Preglednica IV: Pridobljeni rezultati vezave (vezalna energija) zdravilnih učinkovin, ki se uporabljajo za moduliranje PPAR in njihova ATC klasifikacija. V desnem kotu je označeno ali obstajajo še kaki podatki o vezavi določene zdravilne učinkovine na ta jedrni receptor.** MD-mehanizem delovanja, PC- PubChem, DB- DrugBank, CH- ChEMBL in številka označuje članek (referenca pod to številko); + pravilno napoveduje, - nepravilno napoveduje; če zraven ni oznake, pomeni, da ni podatkov v podatkovnih bazah in strokovnih člankih.

Spojina	Fenofibrat	Gemfibrozil	Pioglitazon
AR	AR : -6.0 PC+	AR : -7.4 PC+	AR : -7.7
AR an.	AR an.: -5.7 PC-	AR an.: -7.1 PC+	AR an.: -7.3
ER $\alpha$	ER $\alpha$ : -7.9 PC+	ER $\alpha$ : -6.8 PC+	ER $\alpha$ : -8.5
ER $\alpha$ an.	ER $\alpha$ an.: -8.1 PC-	ER $\alpha$ an.: -7.4 PC+	ER $\alpha$ an.: -8.4
ER $\beta$	ER $\beta$ : -5.0	ER $\beta$ : -7.6	ER $\beta$ : -8.7
ER $\beta$ an.	ER $\beta$ an.: -7.6	ER $\beta$ an.: -7.5	ER $\beta$ an.: -7.9
GR	GR: -8.8 PC-	GR: -7.0 PC+	GR: -9.1 124+
GR an.	GR an.: -7.6 PC-	GR an.: -6.7 PC+	GR an.: -8.5
LXR $\alpha$	LXR $\alpha$ : -9.4	LXR $\alpha$ : -8.4	LXR $\alpha$ : -10.0
LXR $\beta$	LXR $\beta$ : -9.9	LXR $\beta$ : -7.9	LXR $\beta$ : -9.8
PPAR $\alpha$	PPAR $\alpha$ : -7.5 MD-	PPAR $\alpha$ : -6.8 MD-,PC-	PPAR $\alpha$ : -8.6 CH-,PC-
PPAR $\beta$	PPAR $\beta$ : -8.6 CH-,PC+	PPAR $\beta$ : -7.9 CH-,PC+	PPAR $\beta$ : -9.0 PC+
PPAR $\gamma$	PPAR $\gamma$ : -8.0 CH-,PC+	PPAR $\gamma$ : -6.8 CH-,PC+	PPAR $\gamma$ : -8.5 MD-,PC-
RXR $\alpha$	RXR $\alpha$ : -9.2 PC+	RXR $\alpha$ : -8.5 PC+	RXR $\alpha$ : -9.4
TR $\alpha$	TR $\alpha$ : -8.2	TR $\alpha$ : -8.0	TR $\alpha$ : -8.6
TR $\beta$	TR $\beta$ : -9.1 PC-	TR $\beta$ : -7.7 PC+	TR $\beta$ : -9.1
ATC	C10AB05	C10AB04	A10BG03

#### 4.1.5 Zdravilne učinkovine, ki se vežejo na LXR $\alpha$ , LXR $\beta$ , RXR $\alpha$ , TR $\alpha$ in TR $\beta$ (skupina E)

V Preglednici V so navedene zdravilne učinkovine, ki imajo potrjeno vezavo na RXR $\alpha$ , TR $\alpha$  in TR $\beta$ , oz. se uporabljajo za moduliranje teh jedrnih receptorjev. V primeru alitretinoina je napovednost vezave na RXR $\alpha$  uspešna, saj jo ED razvrsti v razred »rumen«. V primeru levotiroksina ED le deloma pravilno oceni vezavo, saj v razred »rumen« razvrsti vezavo na TR $\alpha$  in v razred »zelen« vezavo na TR $\beta$ . Preglednica je sestavljena po ATC klasifikaciji.

#### Vezava učinkovin iz skupine E na jedrne receptorje, ki jih napoveduje ED in njihova primerjava z že znanimi podatki:

Mehanizem delovanja **acitretina**, ki je retinoid, je neznan, vendar se domneva, da deluje preko tarčnih receptorjev RAR in RXR (125), kar ED ne potrdi, saj je vezava na RXR $\alpha$  razvrščena v razred »zelen«. ChEMBL pa napoveduje vezavo na RXR $\alpha$  (126), kar ED spet ne potrdi, saj je taka interakcija razvrščena v razred »zelen«. PubChem navaja, da se acitretin veže na ER $\alpha$ , ER $\alpha$ an. in TR $\beta$  (125), za kar ED pravilno napoveduje le vezavo na TR $\beta$ . V PubChem smo našli podatke, da se acitretin ne veže na AR, ARan., GR in GRan. (125), za kar ED pravilno napoveduje uvrstitev v razred »zelen« za vse receptorje razen za GR, za katerega razvrsti vezavo v razred »rumen«.

Terapevtske tarče **alitretinoina** so RAR in RXR (127), kar ED pravilno napoveduje, saj vezavo alitretinoina na RXR $\alpha$  razvrsti v razred »rumen«. PubChem navaja, da se veže na ER $\alpha$ an., PPAR $\gamma$ , RXR $\alpha$  in TR $\beta$ , ne pa na AR, ARan., ER $\alpha$  in GRan (127). S podatki ED se ne ujemajo le rezultati za ARan., PPAR $\gamma$  in TR $\beta$ , medtem ko ED ostale pravilno razvrsti.

**Levotiroksin** se terapevtsko uporablja kot TR $\alpha$  in TR $\beta$  agonist (128). ED pravilno napoveduje vezavo na TR $\alpha$ , ki jo razvrsti v razred »rumen«, medtem ko napačno razvrsti TR $\beta$  v razred »zelen«. PubChem navaja, da se veže na GRan. in TR $\beta$ , vendar vezave na AR, ARan., ER $\alpha$ , ER $\alpha$ an., PPAR $\alpha$ , PPAR $\beta$ , PPAR $\gamma$  in RXR $\alpha$  niso potrdili (123). Z rezultati pridobljenimi z ED se ne ujema le napoved za jedrne receptorje GR, GRan. in TR $\beta$ , hkrati pa ED ostale pravilno razvrsti v razred »zelen«.

**Preglednica V: Pridobljeni rezultati vezave (vezalna energija) zdravilnih učinkovin, ki se uporabljajo za moduliranje RXR $\alpha$  in TR in njihova ATC klasifikacija. V desnem kotu je označeno ali obstajajo še kaki podatki o vezavi določene zdravilne učinkovine na ta jedrni receptor.** MD-mehanizem delovanja, PC-PubChem, DB-DrugBank, CH-ChEMBL in številka označuje članek (referenca pod to številko); + pravilno napoveduje, - nepravilno napoveduje; če zraven ni oznake, pomeni, da ni podatkov v podatkovnih bazah in strokovnih člankih.

Spojina	Acitretin	Alitretinoin	Levotiroksin
AR	AR : -0.2 PC+	AR : -3.4 PC+	AR : 0.9 PC+
AR an.	AR an.: 1.8 PC+	AR an.: -6.2 PC-	AR an.: -2.6 PC+
ER $\alpha$	ER $\alpha$ : -7.1 PC-	ER $\alpha$ : -8.2 PC+	ER $\alpha$ : -4.3 PC+
ER $\alpha$ an.	ER $\alpha$ an.: -7.6 PC-	ER $\alpha$ an.: -8.9 PC+	ER $\alpha$ an.: -6.6 PC+
ER $\beta$	ER $\beta$ : -3.1	ER $\beta$ : -6.5	ER $\beta$ : 0.3
ER $\beta$ an.	ER $\beta$ an.: -6.5	ER $\beta$ an.: -7.8	ER $\beta$ an.: -5.3
GR	GR: -8.9 PC-	GR: -8.5	GR: -7.6 PC-
GR an.	GR an.: -7.2 PC+	GR an.: -8.4 PC+	GR an.: -6.7 PC-
LXR $\alpha$	LXR $\alpha$ : -9.5	LXR $\alpha$ : -9.4	LXR $\alpha$ : -6.0
LXR $\beta$	LXR $\beta$ : -9.9	LXR $\beta$ : -9.6	LXR $\beta$ : -5.9
PPAR $\alpha$	PPAR $\alpha$ : -7.6	PPAR $\alpha$ : -7.8	PPAR $\alpha$ : -6.6 PC+
PPAR $\beta$	PPAR $\beta$ : -7.8	PPAR $\beta$ : -8.5	PPAR $\beta$ : -6.2 PC+
PPAR $\gamma$	PPAR $\gamma$ : -7.8	PPAR $\gamma$ : -7.9 PC-	PPAR $\gamma$ : -7.0 PC+
RXR $\alpha$	RXR $\alpha$ : -8.0 CH-	RXR $\alpha$ : -10.3 MD+,PC+	RXR $\alpha$ : -7.7 PC+
TR $\alpha$	TR $\alpha$ : -8.6	TR $\alpha$ : -7.9	TR $\alpha$ : -7.8 MD+
TR $\beta$	TR $\beta$ : -9.3 PC+	TR $\beta$ : -7.1 PC-	TR $\beta$ : -7.8 MD-,PC-
ATC	D05BB02	H03AA01	D11AH04 L01XX22

Ugotovili smo, da je zelo malo učinkovin, ki bi interagirale s temi receptorskimi sistemi. RXR po navadi tvori heterodimere z ostalimi receptorji in je zato malo spojin, ki se vežejo le na RXR $\alpha$ .

V Centralni bazi zdravil smo našli le eno zdravilno učinkovino, ki se uporablja za moduliranje tiroidnih receptorjev (levotiroksin). Včasih se levotiroksin kombinira z liotironinom, ki tudi modulira te receptorje, vendar se ne uporablja samostojno in ga v nalogi nismo obravnavali (129).

V seznamu zdravilnih učinkovin, ki smo ga uporabljali za namen magistrske naloge, ni nobene zdravilne učinkovine, ki spada v skupino učinkovin, ki se veže na LXR $\alpha$  in LXR $\beta$  in na ta način sproži terapevtsko delovanje.

Ena izmed hipotez, ki smo jih želeli z našo raziskavo potrditi ali zavreči, je bila naslednja:

**Med zdravilnimi učinkovinami, registriranimi v Republiki Sloveniji, obstajajo tudi take učinkovine, ki preko vezave na jedrne receptorje izkazujejo farmakološko delovanje, za**

### **katere računalniški program Endocrine Disruptome napove visoko afiniteto vezave na proučevane jedrne receptorje.**

Obravnavali smo 34 spojin, ki se v terapevtske namene uporabljajo zaradi moduliranja enega med obravnavanih jedrnih receptorjev. Med njimi je ED le v primeru testosterona, ki se uporablja za moduliranje AR in estradiola, estriola, klomifena, tamoksifena, toremifena in fulvestranta, ki se uporabljajo za moduliranje ER, napovedoval vezavo na te receptorje z visoko afiniteto. Za učinkovine, ki se uporabljajo za moduliranje ostalih jedrnih receptorjev, ED ne napoveduje nobene vezave razvrščeno v razred »rdeč« in jih ED razdeli v ostale razrede. Največ zadetkov, razvrščenih v razred »rdeč«, smo pridobili za skupino spojin, ki se terapevtsko uporabljajo preko moduliranja estrogenskih receptorjev. Skupina zdravil, ki smo jo opredelili kot prvo skupino (podskupine A-E), je zelo dobro preiskovana glede vezav na druge jedrne receptorje, ki niso njihove prvotne tarče.

Na osnovi teh podatkov lahko potrdimo hipotezo, da med zdravilnimi učinkovinami, registriranimi v Republiki Sloveniji, obstajajo tudi take učinkovine, ki preko vezave na jedrne receptorje izkazujejo farmakološko delovanje, za katere računalniški program Endocrine Disruptome napove visoko afiniteto vezave na proučevane jedrne receptorje, največkrat na estrogenske receptorje.

#### **4.2 Zdravilne učinkovine, za katere program ED napoveduje vsaj za en receptor vezavo razvrščeno v razred »rdeč«**

V Preglednici VI, ki je podana v Prilogi 2, so zbrani podatki o spojinah, za katere ED podaja vezavo na vsaj enega od jedrnih receptorjev, ki so razvrščeni v razred z visoko možnostjo vezave, oz. razred »rdeč«. Nobeden od 12 jedrnih receptorjev, ki jih obravnava ED, ni terapevtska tarča omenjenih spojin in se v terapevtske namene ne uporabljajo zaradi moduliranja teh jedrnih receptorjev. Vendar smo za nekatere spojine pridobili podatek iz različnih študij in podatkovnih bazah o njihovi interakciji z omenjenimi receptorji, kar smo uporabili pri oceni napovednosti programa. Preglednica je sestavljena po ATC klasifikaciji.

V tej skupini smo zbrali 99 spojin, za katere je ED napovedoval vsaj za en receptor vezavo razvrščeno v razred »rdeč«. Med njimi se nahajajo tudi take, za katere smo pridobili podatke iz člankov in podatkovnih baz, da interagirajo vsaj z enim od 12-ih jedrnih receptorjev, za katere ED napoveduje vezavo. Te rezultate smo uporabili pri oceni napovednosti programa. Za 70 učinkovin pa je ED napovedal vezavo, klasificirano v razred »rdeč«, vsaj na en jedrni receptor, za kar pa nismo našli potrditve po literaturnem pregledu oz. v uporabljenih bazah podatkov. Obe skupini podrobneje predstavljamo v nadaljevanju.

#### **4.2.1 Primerjava rezultatov pridobljenih z računalniškim programom ED z ostalimi znanimi in objavljenimi podatki za učinkovine, katere primarna tarča niso nekateri od 12 obravnavanih jedrnih receptorjev**

Terapevtska tarča **glibenklamida**, **glimepirida** in **glipizida** je receptor za sulfoniluree (kalijeve ionske kanale), vendar se vežejo tudi na PPAR $\gamma$  kot agonisti (130-132), kar ED pravilno razvrsti v razrede, ki napovedujejo vezavo. PubChem baza tudi navaja veliko interakcij omenjenih spojin z ostalimi jedrnimi receptorji. Tako navaja za glibenklamid, da se veže na PPAR $\gamma$ , ne interagira pa z AR, ARan., ER $\alpha$ , ER $\alpha$ an., GR, GRan., PPAR $\beta$ , RXR $\alpha$  in TR $\beta$  (130), kar potrjuje tudi testiranje z ED za receptorje AR, ARan., PPAR $\gamma$  in RXR $\alpha$ . V primeru glimepirida PubChem navaja, da se veže na PPAR $\gamma$ , ne pa na AR, ARan., ER $\alpha$ , ER $\alpha$ an., GR, GRan., PPAR $\beta$ , RXR $\alpha$  in TR $\beta$  (131). Rezultati napovedovanja z ED se ujemajo s podatki iz PubChem za interakcije z naslednjimi receptorji: AR, ARan., PPAR $\beta$ , PPAR $\gamma$  in TR $\beta$ . V primeru glipizida pa PubChem navaja, da se ta učinkovina veže na PPAR $\gamma$ , medtem ko ni interakcij z AR, ARan., ER $\alpha$ , ER $\alpha$ an., GR, GRan., PPAR $\beta$ , RXR $\alpha$  in TR $\beta$  (132). ED enako oceni interakcije z AR, ARan., PPAR $\beta$ , PPAR $\gamma$  in RXR $\alpha$ .

**Glikvidon** se terapevtsko uporablja kot zaviralec kalijevih kanalov odvisnih od ATP-ja, vendar potrjeno izkazuje tudi PPAR $\gamma$  agonistično delovanje (133). S tem se sklada tudi napoved ED, ki učinkovino pravilno razvrsti v razred »oranžen«. PubChem navaja, da se veže na PPAR $\gamma$ , ne veže pa se na AR, ARan., ER $\alpha$ , ER $\alpha$ an., GR, GRan., PPAR $\beta$ , RXR $\alpha$  in TR $\beta$  (133). Napoved vezave, ki jo dobimo z ED, je skladna s prej omenjenimi podatki iz PubChem baze za receptorje AR, ARan., RXR $\alpha$  in TR $\beta$ .



**Levonorgestrel** je agonist PR, prav tako je potrjeno tudi agonist na AR (134), kar se sklada tudi z rezultati, ki jih poda ED, saj vezavo na AR razvrsti v razred »rdeč«. ChEMBL napoveduje vezavo levonorgestrela na AR in GR (135), kar ED ne potrди le v primeru GRan. V člankih smo zasledili, da se levonorgestrel ne veže na nobenega od podtipov ER, na GR pa se veže z nizko afiniteto (136), kar potrjujejo tudi rezultati napovedi pridobljene z ED razen pri vezavi na ER $\alpha$ , ki ga ED razporedi v razred »rumen«. V bazi PubChem smo našli podatke, da levonorgestrel interagira tudi z AR, ARan., ER $\alpha$  in GRan., medtem ko niso mogli dokazati vezave s PPAR $\beta$ , PPAR $\gamma$ , RXR $\alpha$  in TR $\beta$  (134). Podatki, pridobljeni iz študije Kumar-ja in sodelavcev ter PubChem baze podatkov, se ne ujemajo pri vrednotenju vezave učinkovine na ER $\alpha$ , saj se modeli, na katerih so izvedene študije, razlikujejo. PubChem podatki, ki potrđijo vezavo na ER $\alpha$ , so pridobljeni na BG1 Luc-4E2 celicah (137), medtem ko je bila druga študija, ki ne potrđi vezave levonorgestrela na ER $\alpha$ , izvedena *in vivo* na miših in je ugotavljala predvsem spremembe na organih, ki jih uravnavajo estrogeni (npr. teža maternice) (136). Če upoštevamo, da se levonorgestrel veže na ER $\alpha$ , se rezultati pridobljeni z ED ujemajo z vsemi literaturnimi podatki, razen vezave na GRan., ki jo razvrsti v razred »zelen«.

Iz ATC klasifikacije (B01AA03) je razvidno, da **varfarin** sodi v skupino zdravil za zdravljenje boleznih krvi in krvotvornih organov. V študiji Rulcova in sodelavcev so zasledili, da ne interagira z GR (138), kar je v nasprotju z našimi rezultati, saj je interakcija z GR razvrščena v razred »rumen«. PubChem podaja podatek, da se ne veže na AR, ARan., ER $\alpha$ , ER $\alpha$ an., GR, GRan., PPAR $\alpha$ , PPAR $\beta$ , RXR $\alpha$  in TR $\beta$  (139), kar se sklada z napovednostjo vezave ED za receptorje AR, PPAR $\alpha$ , PPAR $\beta$  in RXR $\alpha$ . Interagirala pa naj bi po podatkih iz te baze tudi s PPAR $\gamma$  (139), vendar pa ED te vezave ne potrđi in razvrsti verjetnost te interakcije v razred »zelen«.

Glavne terapevtske tarče **drospirenona** so mineralokortikoidni in progesteronski receptorji. ChEMBL napoveduje še njegovo vezavo na GR (140), kar potrđi tudi ED. V literaturi smo zasledili kar nekaj študij, ki so se ukvarjale s proučevanjem endokrinega delovanja te učinkovine. V predkliničnih študijah na živalih so ugotovili, da ima tudi antiandrogeno dejavnost, saj se veže na AR kot antagonist (141), kar se tudi ujema z našimi rezultati, saj ga ED razvrsti v razred »rumen«. Za drospirenon niso mogli potrđiti GR in ER agonističnega niti antagonističnega delovanja v *in vivo* testiranju na podganah (141), kar pa se ujema z našimi

rezultati za vse jedrne receptorje, razen za GR, ki ga ED razvrsti v razred »rumen«. PubChem pa navaja, da se drospirenon veže na AR, ARan. in GRan. (142), kar ED potrди za ARan. in GR. Tudi navaja, da se ne veže na ER $\alpha$ , ER $\alpha$ an., GR in TR $\beta$  (142), kar tudi ED napove za vse jedrne receptorje, razen za GR in TR $\beta$ , ki jih uvrsti v razrede, ki napovedujejo vezavo.

**Nebivolol** se terapevtsko uporablja kot zaviralec beta (143). Vendar se veže tudi na ER $\alpha$ , ER $\beta$  in je delni antagonist ER $\alpha$  in ER $\beta$ . O interakcijah z AR in GR ne poročajo (144). ChEMBL pa napoveduje vezavo na GR in GRan. (143). Rezultati pridobljeni z ED se ujemajo za ER $\alpha$ , ER $\alpha$ an. in ER $\beta$ an., medtem ko je napoved za ostale omenjene receptorje z ED različna.

**Kandesartan** se v terapevtske namene uporablja kot antagonist angiotenzina 2, medtem pa ima tudi šibko PPAR $\gamma$  agonistično delovanje (145), kar ED pravilno napove in uvrsti to možnost vezave učinkovine v razred »rumen«. Na osnovi podatkov, pridobljenih iz PubChem, lahko sklepamo, da se kandesartan veže na ER $\alpha$  in ER $\alpha$ an. (146), kar ED potrди v primeru ER $\alpha$ an., medtem za ER $\alpha$  napoveduje nizko možnost vezave. Tudi navaja, da se ta učinkovina ne veže na AR, ARan., PPAR $\beta$  in PPAR $\gamma$  (146), kar se ujema z rezultati ED za AR in ARan.

Iz različnih študij lahko ugotovimo, da je **telmisartan** agonist PPAR $\gamma$  in delni agonist PPAR $\alpha$  (147,148). To se tudi ujema z našimi rezultati, saj oba ED razvrsti v razred »oranžen«. V Pubchem-u zasledimo podatek, da se telmisartan ne veže na AR, ARan, ER $\alpha$ , ER $\alpha$ an., GR, GRan. in RXR $\alpha$  (147). Ti rezultati se ujemajo z napovedjo ED razen za ER $\alpha$ an. (uvrstitev v razred »rdeč«) in GRan. (uvrstitev v razred »oranžen«). Agonistične PPAR $\gamma$  lastnosti telmisartana bi lahko prinašale koristne metabolične učinke (regulacija glukoze in metabolizma lipidov), zato se izvajajo v tej smeri s to učinkovino tudi klinične študije (147).

**Ketokonazol** deluje kot inhibitor encima citokrom P450- lanosterol 14  $\alpha$ -demetilaze (CYP51A1) in tako deluje protiglivično (149). Rezultati različnih študij kažejo, da se veže na AR kot antagonist (150), kar se ne ujema z napovedjo ED. Ketokonazol pa ne izkazuje nobenih agonističnih ali antagonističnih učinkov na ER $\alpha$ , nasprotno pa je antagonist ER $\beta$  (151). Zasledimo tudi podatek o antagonističnem delovanju na GR (152). Z našimi rezultati se ti podatki ujemajo le v napovedi, da deluje ketokonazol kot GRan., saj ga v tem primeru ED razvrsti v razred »rumen«. Interakcije z ER $\alpha$  in ER $\alpha$ an. so razvrščene v razred »rdeč«, kar pa se ne ujema s prej omenjenimi študijami, razen za ER $\beta$ an.

**Darunavir, maravirok in tipranavir** so HIV proteazni inhibitorji (153-155). Neposredne interakcije darunavirja, maraviroka in tipranavirja z LBD LXR $\alpha$  in LXR $\beta$  so bile napovedane z *in silico* in potrjene z *in vitro* metodami, kar se ujema z rezultati ED za maravirok in tipranavir. ED pravilno napoveduje vezavo darunavira na LXR $\beta$ , medtem ko vezavo na LXR $\alpha$  razvrsti v razred »zelen«. V *in vitro* študijah za GR, ER $\alpha$  in ER $\beta$  niso mogli potrditi nikakršne interakcije z darunavirjem (117), kar se le delno ujema z našimi rezultati.

Primarna tarča **linestrenola** sicer niso LXR, vendar so s študijo Fan in sodelavci dokazali, da ima zmerno jakost kot LXR agonist (156). To se tudi ujema s podatki pridobljenimi z ED, saj vezavo linestrenola na LXR $\alpha$  in LXR $\beta$  razvrsti v razred »rumen«.

Primarna tarča **didrogesterona** je progesteronski receptor, vendar so potrdili, da ima tudi AR agonistično in antagonistično delovanje, neaktiven je kot modulator ER $\alpha$  in ER $\beta$  ter šibek antagonist GR, vendar ti učinki niso klinično relevantni (157,158). Za didrogesteron ChEMBL napoveduje močno vezavo na AR in GR (159). PubChem pa podaja podatek, da se ne veže na ER $\alpha$ , ER $\alpha$ an., PPAR $\beta$  in PPAR $\gamma$  (157). Naši rezultati se ujemajo s pridobljenimi podatki za AR, ARan., GR in GRan., ki so razvrščeni v razrede, ki napovedujejo vezavo in prav tako za ER $\beta$ an., PPAR $\beta$  in PPAR $\gamma$ , ki sodijo v razred »zelen«. Ne ujemajo pa se rezultati vezave za to učinkovino na ER $\alpha$ , ER $\alpha$ an. in ER $\beta$ , ker jih program razvrsti v razred »rdeč« in za ER $\alpha$ , ki sodi v razred »rumen«. Po podatkih iz zgornje študije pa interakcije s temi receptorji ni.

Mehanizem delovanja **prasterona** še ni popolnoma pojasnjen (160). Tako so dokazali, da prasteron deluje kot antagonist AR ter agonist ER $\alpha$  in ER $\beta$  in ima šibko agonistično delovanje na AR (161). V podatkovni bazi DrugBank obstaja podatek, da je prasteron aktivator PPAR $\alpha$ , vendar predpostavljajo, da ne interagira direktno z receptorjem in ga aktivira preko drugačnega mehanizma (160), kar se ujema z našimi rezultati, saj je interakcija med njim in PPAR $\alpha$  razvrščena v razred »zelen«. ChEMBL napoveduje vezavo na AR, LXR $\alpha$ , GR, ER $\beta$  in ER $\alpha$  (162). PubChem podaja podatke, da se prasteron veže na ARan., ER $\alpha$  in GRan., in, da ne modulira AR, PPAR $\beta$  in PPAR $\gamma$  ter TR $\beta$  (160). Zaključimo lahko, da se poznane interakcije prasterona z zgoraj omenjenimi receptorji večinoma ujemajo z našimi rezultati.

**Ritonavir** je HIV proteazni inhibitor (163), s katerim so izvedli veliko študij, ki so proučevale, kako učinkovina modulira jedrne receptorje. Tako v študiji Svärd-a in sodelavcev

niso zaznali direktne vezave ritonavirja na LXR $\alpha$  in LXR $\beta$  (117), kar je skladno z ugotovitvami iz ostalih študij in s čimer se ujema tudi rezultat ED. Tudi za GR, ER $\alpha$  in ER $\beta$  niso mogli potrditi nikakršne interakcije (117). Medtem pa so v drugi študiji ugotovili, da se direktno veže ta učinkovina na ER $\alpha$  kot antagonist (164), vendar pa takšne interakcije niso mogli potrditi za ER $\alpha$ , TR $\beta$ , RXR $\alpha$ , LXR $\alpha$ , PPAR $\alpha$ , PPAR $\beta$  in PPAR $\gamma$  (165). Z našimi rezultati se skladajo vezave na ER $\alpha$ an. (razred »rumen«), ER $\beta$ , LXR $\alpha$ , LXR $\beta$ , RXR $\alpha$  in TR $\beta$  (razred »zelen«) in GRan. (razred »rdeč«), ne ujemajo pa se rezultati za ER $\alpha$  (razred »oranžen«), ER $\beta$ an., PPAR $\alpha$ , PPAR $\gamma$  (razred »rdeč«) in GR in PPAR $\beta$  (razred »rumen«).

Podobne študije so opravili še za drug HIV protezani inhibitor **nelfinavir**, ki pa ne kaže interakcij s PPAR $\alpha$ , PPAR $\beta$  ali PPAR $\gamma$  (166), kar je v nasprotju z našimi rezultati, saj so vezave na vse te receptorje razvrščene v razred »rdeč«.

Za **sorafenib**, inhibitor tirozin kinaze, so z molekulskim sidranjem ugotovili visoko afiniteto vezave na PPAR (167). To se delno ujema z našimi rezultati, saj je interakcija s to učinkovino in PPAR $\gamma$  razvrščena v razred »rumen«, medtem ko so interakcije za PPAR $\alpha$  in PPAR $\beta$  uvrščene v razred »zelen«.

Za ostale spojine, za katere so bile izvedene študije vezave na jedrne receptorje, in za katere smo pridobili podatke v podatkovnih bazah PubChem in ChEMBL, so podatki in primerjava z rezultati pridobljenimi z ED zbrani v Preglednici VI v Prilogi 2.

Na osnovi teh podatkov lahko tudi potrdimo 2. hipotezo, ki smo jo želeli preveriti v našem raziskovalnem delu in se glasi:

**Med zdravilnimi učinkovinami, registriranimi v Republiki Sloveniji, obstajajo tudi take učinkovine, za katere računalniški program Endocrine Disruptome napove visoko afiniteto vezave na jedrne receptorje, ki se terapevtsko ne uporabljajo za moduliranje enega od omenjenih jedrnih receptorjev.**

Med obravnavanimi zdravilnimi učinkovinami je ED v primeru 99 učinkovin napovedoval visoko afiniteto vezave na jedrne receptorje, ki niso terapevtska tarča učinkovin. Med njimi smo pridobili podatke o vezavi 70 učinkovin na jedrne receptorjih, ki jih ED razvrsti v razred,

ki ima visoko možnost vezave, o katerih do zdaj ni objavljenih podatkov. To zadnjo skupino učinkovin podrobneje predstavljamo v nadaljevanju.

#### **4.2.2 Učinkovine, ki so bile za katerikoli receptor uvrščene v razred »rdeč«, vendar o tem v dostopni literaturi ni podatkov**

Naslednje učinkovine so se, po preizkušanju v programu ED, izkazale kot močni modulatorji vsaj enega receptorja, za kar nismo mogli najti podatka v dostopnih literturnih virih ali bazah podatkov. Zbrali smo jih v Preglednici VII, kjer navajamo generično ime učinkovine in jedrni receptor, za katerega je ED napovedoval visoko afiniteto vezave. Te *in silico* napovedi bi bilo potrebno potrditi v *in vitro* in *in vivo* testih. Na ta način bi potrdili tudi napovedno moč ED za interakcije s preiskovanimi receptorji.

Iz Preglednic VI (Priloga 2) in VII je razvidno, da napovedni program ED največkrat napoveduje vezavo razvrščeno v razred »rdeč« za zdravila z delovanjem na novotvorbe in imunomodulatorje (ATC skupina L) in zdravila z delovanjem na živčevje (ATC skupina N). Za zdravila z delovanjem na novotvorbe in imunomodulatorje smo ugotovili, da je zelo malo raziskav, ki bi se ukvarjale z njihovo vezavo na jedrne receptorje. Potrjenih dokazov o tem, da bi aktivacija teh jedrnih receptorjev z zdravili z delovanjem na novotvorbe in imunomodulatorje izkazovale neželene učinke zaradi vezave na obravnavane jedrne receptorje, nismo zasledili. Zato bi bilo potrebno narediti več *in vitro* in *in vivo* študij za popolno ovrednotenje vpliva teh spojin na proučevane receptorje.

Največ močnih interakcij ED napoveduje za učinkovino **nilotinib**. Njegova vezava je razvrščena v razred z visoko možnostjo vezave na naslednje jedrne receptorje: ER $\alpha$ an., ER $\beta$ an., GRan., LXR $\alpha$ , PPAR $\alpha$ , PPAR $\beta$  in PPAR $\gamma$ .

**Preglednica VII: Učinkovine, za katere je ED določil njihovo možno delovanje preko moduliranja posameznih jedrnih receptorjih in zanje v literaturi še ni podatkov.** Št-zaporedna številka učinkovine; Uč- generično ime učinkovine; JR- jedrni receptor, za katerega ED za določeno učinkovino napoveduje vezavo razvrščeno v razred »rdeč«. Preglednica je sestavljena po abecednem vrstnem redu učinkovin.

Št.	Uč.	JR	Št.	Uč.	JR	Št.	Uč.	JR
1.	<b>Adapalen</b>	LXR $\alpha$ , LXR $\beta$	25.	<b>Hidromorfon</b>	ARan., ER $\alpha$ , ER $\beta$ , ER $\beta$ an	49.	<b>Nitizinon</b>	ARan.
2.	<b>Afatinib</b>	PPAR $\alpha$ , PPAR $\gamma$	26.	<b>Ibrutinib</b>	GRan., LXR $\beta$ , PPAR $\beta$ , PPAR $\gamma$	50.	<b>Noretisteron</b>	ER $\beta$ an.
3.	<b>Aprepitant</b>	ER $\alpha$ an., GRan., LXR $\beta$ , PPAR $\gamma$	27.	<b>Imatinib</b>	ER $\alpha$ an.	51.	<b>Olopatadin</b>	ARan., ER $\alpha$
4.	<b>Apiksaban</b>	PPAR $\gamma$	28.	<b>Indinavir</b>	ER $\alpha$ , PPAR $\alpha$ , PPAR $\beta$ , PPAR $\gamma$	52.	<b>Oksazepam</b>	ER $\beta$
5.	<b>Asenapin</b>	ER $\beta$ an.	29.	<b>Irbesartan</b>	ER $\beta$ an.	53.	<b>Paliperidon</b>	ER $\alpha$ an., PPAR $\beta$
6.	<b>Atovakon</b>	LXR $\alpha$	30.	<b>Irinotekan</b>	ER $\alpha$ an., ER $\beta$ an., GRan	54.	<b>Palonosetron</b>	AR, ARan., ER $\alpha$
7.	<b>Bifonazol</b>	ER $\beta$ an.	31.	<b>Kanaglifozin</b>	PPAR $\beta$	55.	<b>Parekoksib</b>	ER $\alpha$ an.
8.	<b>Biperiden</b>	ARan., ER $\alpha$	32.	<b>Kandesartan</b>	ER $\beta$ an.	56.	<b>Paritaprevir</b>	GRan.
9.	<b>Celekoksib</b>	ER $\alpha$ , ER $\alpha$ an., ER $\beta$ an.	33.	<b>Karbamazepin</b>	ER $\beta$ an.	57.	<b>Pomalidomid</b>	AR
10.	<b>Ceritinib</b>	ER $\beta$ an.	34.	<b>Klonazepam</b>	ER $\beta$ an.	58.	<b>Ponatinib</b>	GRan., PPAR $\gamma$
11.	<b>Cinacalcet</b>	ER $\alpha$ , ER $\beta$ an., TR $\alpha$	35.	<b>Klozapin</b>	PPAR $\alpha$	59.	<b>Regorafenib</b>	ER $\alpha$ , ER $\beta$ an., PPAR $\beta$
12.	<b>Dabrafenib</b>	ER $\beta$ an.	36.	<b>Kobicistat</b>	PPAR $\gamma$	60.	<b>Risperidon</b>	ER $\beta$ an., LXR $\beta$
13.	<b>Darifenacin</b>	ER $\alpha$ , PPAR $\alpha$	37.	<b>Lapatinib</b>	PPAR $\alpha$ , PPAR $\gamma$	61.	<b>Rupatadain</b>	GRan.
14.	<b>Darunavir</b>	PPAR $\alpha$	38.	<b>Lopinavir</b>	PPAR $\gamma$	62.	<b>Sertralin</b>	ER $\alpha$
15.	<b>Domperidon</b>	PPAR $\beta$	39.	<b>Lorazepam</b>	ER $\beta$	63.	<b>Sitagliptin</b>	ER $\alpha$
16.	<b>Drospirenon</b>	LXR $\beta$	40.	<b>Lurasidon</b>	ER $\beta$ an., GRan., LXR $\alpha$ , LXR $\beta$	64.	<b>Sorafenib</b>	ER $\alpha$ an.
17.	<b>Ebastin</b>	ER $\beta$ an., PPAR $\alpha$	41.	<b>Maravirok</b>	PPAR $\alpha$ , PPAR $\beta$	65.	<b>Tadalafil</b>	ER $\beta$ an.
18.	<b>Eltrombopag</b>	ERan., LXR $\alpha$ , LXR $\beta$ , PPAR $\alpha$	42.	<b>Mianserin</b>	ER $\beta$ an.	66.	<b>Telmisartan</b>	ER $\beta$ an.
19.	<b>Eslikarbazepin</b>	ER $\alpha$	43.	<b>Montelukast</b>	ER $\alpha$ an., ER $\beta$ an., PPAR $\gamma$	67.	<b>Tipranavir</b>	PPAR $\alpha$ , PPAR $\beta$
20.	<b>Ezetimib</b>	ER $\beta$ an.	44.	<b>Morfin</b>	ER $\alpha$ , ER $\beta$	68.	<b>Pleriksafor</b>	ER $\alpha$ an., ER $\beta$ an.
21.	<b>Fosaprepitant</b>	ER $\alpha$ an., ER $\beta$ an., GRan., PPAR $\gamma$	45.	<b>Naftifin</b>	ARan., ER $\beta$	69.	<b>Vortiooksetin</b>	ARan.
22.	<b>Feksofenadin</b>	ER $\alpha$	46.	<b>Nelfinavir</b>	ER $\alpha$ an., ER $\beta$ an., GRan.	70.	<b>Zafirlukast</b>	ER $\beta$ an.
23.	<b>Glikvidon</b>	ER $\beta$ an	47.	<b>Nilotinib</b>	ER $\alpha$ an., ER $\beta$ an., GRan., LXR $\alpha$ , PPAR $\alpha$ , PPAR $\beta$ , PPAR $\gamma$			
24.	<b>Glimepirid</b>	PPAR $\alpha$	48.	<b>Nintedanib</b>	GRan.			

Za spojine aprepitant, eltrombopag, fosaprepitant, hidromorfon, ibrutinib, indinavir, lurasidon ED prav tako napoveduje veliko močnih interakcij. Tako v primeru **aprepitanta** v razred »rdeč« razvrsti interakcije z ER $\alpha$ an., GRan., LXR $\beta$ , PPAR $\gamma$ . Za **eltrombopag** v razred »rdeč« razvrsti interakcije z ERan., LXR $\alpha$ , LXR $\beta$ , PPAR $\alpha$ . Za **fosaprepitant** v razred »rdeč« razvrsti interakcije z ER $\alpha$ an.,ER $\beta$ an., GRan., PPAR $\gamma$ . Za hidromorfon v razred »rdeč« razvrsti interakcije z ARan., ER $\alpha$ , ER $\beta$ , ER $\beta$ an. Za **ibrutinib** v razred »rdeč« razvrsti interakcije z GRan., LXR $\beta$ , PPAR $\beta$ , PPAR $\gamma$ . Za **indinavir** v razred »rdeč« razvrsti interakcije z ER $\alpha$ , PPAR $\alpha$  PPAR $\beta$ , PPAR $\gamma$ . Za **lurasidon** pa v razred »rdeč« razvrsti interakcije z ER $\beta$ an., GRan., LXR $\alpha$ , LXR $\beta$ .

Na osnovi teh podatkov lahko tudi potrdimo 3. hipotezo, ki smo jo želeli preveriti v našem raziskovalnem delu in se glasi:

**Med zdravilnimi učinkovinami, registriranimi v Republiki Sloveniji, obstajajo tudi take učinkovine, za katere Endocrine Disruptome napove visoko afiniteto vezave vsaj za eno vrsto proučevanih receptorjev, za kar do zdaj še niso bile objavljene nobene študije in tovrstne interakcije v literaturi še niso bile omenjene.**

Med obravnavanimi zdravilnimi učinkovinami je ED v primeru 70 učinkovin napovedoval visoko afiniteto vezave na jedrne receptorje, ki niso terapevtska tarča učinkovin in o katerih do zdaj ni objavljenih podatkov.

Med ostalimi, že prej omenjenimi hipotezami, ki smo jih želeli z našo raziskavo potrditi ali zavreči, je bila tudi naslednja:

**Med zdravilnimi učinkovinami, registriranimi v Republiki Sloveniji, obstajajo tudi take učinkovine, za katere računalniški program Endocrine Disruptome ne napove vezave na noben preizkušan jedrni receptor z visoko afiniteto.**

To hipotezo lahko potrdimo, saj smo obravnavali 629 spojin, za katere ED ne napoveduje vezave razvrščene v razred, ki napoveduje visoko možnost vezave. Rezultate pridobljene z ED za te učinkovine smo podali v Prilogi 2.

### 4.3 Ocena napovednosti programa

Z uporabo podatkovnih baz in podatkov o interakcijah proučevanih spojin z jedrnimi receptorji, ki smo jih zasledili v člankih, smo skušali oceniti pravilnost napovednosti računalniškega programa Endocrine Disruptome. Tako smo za oceno uporabili občutljivost, ki nam pove delež biološko aktivnih – pozitivnih spojin, ki jih programski modul pravilno opredeli; specifičnost, ki nam pove delež biološko neaktivnih – negativnih spojin, ki jih modul pravilno opredeli; in točnost, ki nam pove delež vseh spojin, ki jih modul pravilno napove. Izračun občutljivosti, specifičnosti in točnosti smo izvedli po enačbah, ki so navedene spodaj (64):

$$\text{Točnost} = \frac{\text{pravilno pozitivni} + \text{pravilno negativni}}{\text{pravilno pozitivni} + \text{napačno pozitivni} + \text{pravilno negativni} + \text{napačno negativni}}$$

$$\text{Občutljivost} = \frac{\text{pravilno pozitivni}}{\text{pravilno pozitivni} + \text{napačno negativni}}$$

$$\text{Specifičnost} = \frac{\text{pravilno negativni}}{\text{pravilno negativni} + \text{napačno pozitivni}}$$

Pri tem smo upoštevali kar nekaj omejitev glede na podatke, ki smo jih uporabili za oceno napovednosti programa. Baza podatkov ChEMBL napoveduje vezavo *in silico*, ne podaja pa nadaljnje funkcijske opredelitve (agonizem, antagonizem), zato teh podatkov nismo uporabili pri oceni programa Endocrine Disruptome. Tudi nismo uporabili vseh podatkov iz člankov, ki smo jih uspeli pridobiti, saj so tudi pridobljeni z *in silico* metodami (podatki za deksametazon (LXR $\alpha$ , LXR $\beta$  in ER $\alpha$ ) in sorafenib).

Preglednica VIII podaja izračunane vrednosti občutljivosti, specifičnosti in točnosti za posamezen receptor in celoten program.

Največjo točnost napovedovanja vezave spojine na receptor ima ED za RXR $\alpha$ , kjer pravilno napove vezavo v 93 % primerov. Najmanj točno napoveduje za GR, kjer le v 29 % primerov daje pravilni rezultat, oz. pravilno napoveduje vezavo spojine na GR.



**Preglednica VIII: Rezultati pravilnosti vezave na jedrne receptorje.** Oznake za preštete vrednosti: Pp-pravilno pozitivni, Pn-pravilno negativni, Np-napačno pozitivni, Nn-napačno negativni; oznake za izračunane vrednosti: T-točnost, O-občutljivost, S-specifičnost; CP-celotni program; Jr-jedrni receptor.

Jr	AR	AR an.	ER $\alpha$	ER $\alpha$ an.	ER $\beta$	ER $\beta$ an.	GR	GR an.	LXR $\alpha$	LXR $\beta$	PPA R $\alpha$	PPA R $\beta$	PPA R $\mu$	RX R $\alpha$	TR $\alpha$	TR $\beta$	CP
Pp	16	20	14	16	3	7	16	19	3	4	1	1	8	1	1	1	<b>131</b>
Pn	37	25	24	17	9	5	4	4	1	1	12	46	41	42	1	31	<b>300</b>
Np	8	20	30	31	2	4	43	34	0	0	2	9	10	3	0	26	<b>224</b>
Nn	16	13	9	7	5	0	5	9	1	0	3	2	5	0	0	3	<b>78</b>
T	0,69	0,58	0,49	0,46	0,63	0,75	0,29	0,35	0,80	1,00	0,72	0,81	0,77	0,93	1,00	0,52	<b>0,59</b>
O	0,50	0,61	0,61	0,70	0,38	1,00	0,76	0,68	0,75	1,00	0,25	0,33	0,62	1,00	1,00	0,25	<b>0,63</b>
S	0,82	0,56	0,44	0,35	0,82	0,56	0,09	0,11	1,00	1,00	0,86	0,84	0,80	0,93	1,00	0,54	<b>0,57</b>

Za vsak posamezni receptor so narejene ROC krivulje, ki jih najdemo na spletni strani <http://endocrinedisruptome.ki.si/> in izračunane AUC vrednosti, s čimer je povezana moč napovednosti za interakcijo s posameznim receptorjem (50). Najnižji AUC so izračunali za antagonistično obliko androgenega jedrnega receptorja, ki iznaša AUC= 0,5851, zato smo tudi pričakovali, da bo moč napovednosti za ARan. najnižja. Izračunali smo, da je točnost napovedovanja interakcije za ARan. 58 %. Zanimivo je, da je ta vrednost za GR (za katerega je AUC vrednost tudi nizka in iznaša 0,6208) 29 %. Najvišjo AUC so izračunali za PPAR $\alpha$  (AUC= 0.8593), kar se sklada z našimi rezultati točnosti napovedi vezave, ki je bila 72 %. Najbolj točno napoveduje ED vezavo na RXR $\alpha$ - kar v 93 % (AUC RXR $\alpha$ = 0.796).

Menimo, da je podatkov o vezavi spojin na LXR $\alpha$ , LXR $\beta$  in TR $\alpha$  premalo za ustrezno ocenitev napovednosti programa. Za LXR $\alpha$  in LXR $\beta$  smo zbrali le 5 podatkov, za TR $\alpha$  pa 2 podatka, kaj je premalo za verodostojno oceno. Vzrok, da smo pridobili tako malo podatkov je, da so interakcije spojin na splošno s temi receptorji zelo malo raziskane.

Najbolj je ED občutljiv za določanje interakcije z ER $\beta$ an. in RXR $\alpha$ , ki iznaša 100 % in za interakcijo spojin z GR (76 %). Najnižjo občutljivost smo izračunali za PPAR $\alpha$  in TR $\beta$ , ki iznaša 25 %. Specifičnost je najbolj ocenjena za RXR $\alpha$  (93 %), najnižje pa za GR (9 %).

Na osnovi teh podatkov lahko delno potrdimo tudi 5. hipotezo, ki smo si jo zastavili na začetku naloge, ki se glasi:

**Program Endocrine Disruptome ustrezno napoveduje moduliranje delovanja jedrnih receptorjev z zdravilnimi učinkovinami.**

Na temelju izračunov specifičnosti, občutljivosti in točnosti smo ocenili tudi napovednost celotnega programa. Tako s točnostjo 59 % napoveduje vezave spojin na omenjene jedrne receptorje, specifičnost napovedi je 63 % in občutljivosti 57 %. Pri teh ocenah je potrebno poudariti, da smo pri nekaterih receptorjih imeli na voljo omejeno število podatkov, zato so te ocene približne

## 5. SKLEP

Namen naše raziskave je bil ugotoviti ali med zdravilnimi učinkovinami, ki imajo dovoljenje za promet v Republiki Sloveniji, obstajajo tudi take, ki kažejo afiniteto do vezave na jedrne receptorje obravnavane z računalniškim programom Endocrine Disruptome.

Ugotoviti smo tudi želeli, ali računalniški program Endocrine Disruptome ustrezno napoveduje vezavo na jedrne receptorje.

Na podlagi zbranih podatkov in rezultatov eksperimentalnega dela smo prišli do naslednjih ugotovitev:

- Kot nove potencialne modulatorje jedrnih receptorjev, za katere računalniški program Endocrine Disruptome napoveduje visoko možnost vezave spojin (razred »rdeč«), smo identificirali 70 zdravilnih učinkovin.
- V največ primerih se novi potencialni modulatorji jedrnih receptorjev vežejo na ER $\beta$ an (27 primerov). V nobenem primeru ne vežejo na GR, RXR $\alpha$  in TR $\beta$ .
- Za 34 zdravilnih učinkovin, ki preko vezave na jedrne receptorje izkazujejo farmakološko delovanje, kar so potrdile tudi različne študije, je računalniški program Endocrine Disruptome napovedal vezavo še na kak drug jedrni receptor.
- Za 99 zdravilnih učinkovin, katerih prvotna tarča ni noben med 12-imi obravnavanimi jedrnimi receptorji, Endocrine Disruptome razvrsti možnost interakcije v razred »rdeč« vsaj za en receptorski sistem.
- Za 629 zdravilnih učinkovin program Endocrine Disruptome ne napove vezave na noben preizkušan jedrni receptor z visoko afiniteto (jih ne razvrsti v razred »rdeč«).
- Največjo točnost napovedovanja vezave učinkovin na receptorje ima program Endocrine Disruptome za RXR $\alpha$ , kjer pravilno napove vezavo v 93 % primerov. Najmanj točno napoveduje za GR, kjer le v 29 % primerov daje pravilni rezultat, oz. pravilno napoveduje vezavo učinkovine na GR.
- Računalniški program Endocrine Disruptome s točnostjo 59 % napoveduje vezavo učinkovin na omenjene jedrne receptorje. Specifičnost napovedi je 63 % in občutljivosti 57 %.

## 6. LITERATURA

1. Rushton L: The Endocrine System, Infobase Publishing, New York. 2009: 124.
2. Felig P, Frohman LA: Endocrinology and metabolism; fourth edition; McGraw-Hill; United States of America. 2001: 1561.
3. Nussey SS, Whitehead SA: Endocrinology: An Integrated Approach, CRC Press, UK. 2013: 376.
4. Devillers J: Endocrine disruption modeling. Boca Raton ; London ; New York : CRC Press. 2009: 404.
5. Nohynek GJ, Borgert CJ, Dietrich D, Rozman KK: Endocrine disruption: fact or urban legend? *Toxicol Lett.* 2013; 223(3): 295-305.
6. Rousselle C, Ormsby JN, Schaefer B, Lampen A, Platzek T, Hirsch-Ernst K, Warholm M, Oskarsson A, Nielsen PJ, Holmer ML, Emond C: Meeting report: international workshop on endocrine disruptors: exposure and potential impact on consumers health. *Regul Toxicol Pharmacol.* 2013; 65(1): 7-11.
7. Bergman A, Heindel JJ, Jobling S, Kidd KA, Zoeller RT: Endocrine Disrupting Chemicals 2012. WHO Library Cataloguing: 38.
8. Diamanti-Kandarakis E, Bourguignon JP, Giudice LC, Hauser R, Prins GS, Soto AM, Zoeller RT, Gore AC: Endocrine-disrupting chemicals: an Endocrine Society scientific statement. *Endocr Rev.* 2009; 30(4): 293-342.
9. National Institute of Environmental Health Science: National Institutes of Health- U.S. Department of Health and Human Services, maj 2010. Dostopno na spletni strani [15.6.2016]: [http://www.niehs.nih.gov/health/materials/endocrine\\_disruptors\\_508.pdf](http://www.niehs.nih.gov/health/materials/endocrine_disruptors_508.pdf)
10. Wielogórska E, Elliott CT, Danaher M, Connolly L: Endocrine disruptor activity of multiple environmental food chain contaminants. *Toxicol In Vitro.* 2015; 29(1): 211–220.
11. Steketeer K: Molecular Mechanisms of Androgen Receptor Functions. Doktorat, Rotterdam, 2007: 172.
12. Germain P, Staels B, Dacquet C, Spedding M, Laudet V: Overview of Nomenclature of Nuclear Receptors. *Pharmacol Rev.* 2006; 58(4): 685-704.

13. Pereira de Jésus-Tran K, Côté PL, Cantin L, Blanchet J, Labrie F, Breton R: Comparison of crystal structures of human androgen receptor ligand-binding domain complexed with various agonists reveals molecular determinants responsible for binding affinity. *Protein Sci.* 2006; 15(5): 987–999.
14. Wang C, Tian L, Popov VM, Pestell RG: Acetylation and nuclear receptor action. *J Steroid Biochem Mol Biol.* 2011; 123(3-5): 91-100.
15. Levin ER: Integration of the Extranuclear and Nuclear Actions of Estrogen. *Mol Endocrinol.* 2005; 19(8): 1951-9.
16. Dahlman-Wright K, Cavailles V, Fuqua SA, Jordan VC, Katzenellenbogen JA, Korach KS, Maggi A, Muramatsu M, Parker MG, Gustafsson JA: International Union of Pharmacology. LXIV. Estrogen Receptors. *Pharmacol Rev.* 2006; 58(4): 773-781.
17. Leung YK1, Mak P, Hassan S, Ho SM: Estrogen receptor (ER)- $\beta$  isoforms: A key to understanding ER- $\beta$  signaling. *Proc Natl Acad Sci U S A.* 2006; 103(35): 13162–13167.
18. Kumar R, Thompson EB: Gene regulation by the glucocorticoid receptor: Structure: function relationship. *J Steroid Biochem Mol Biol.* 2005; 94(5): 383-94.
19. Lu NZ, Wardell SE, Burnstein KL, Defranco D, Fuller PJ, Giguere V, Hochberg RB, McKay L, Renoir JM, Weigel NL, Wilson EM, McDonnell DP, Cidlowski JA: International Union of Pharmacology. LXV. The Pharmacology and Classification of the Nuclear Receptor Superfamily: Glucocorticoid, Mineralocorticoid, Progesterone, and Androgen Receptors. *Pharmacol Rev.* 2006; 58(4): 782-797.
20. Rouiller-Fabre V, Guerquin MJ, N'Tumba-Byn T, Muczynski V, Moison D, Tourpin S, Messiaen S, Habert R, Livera G: Nuclear receptors and endocrine disruptors in fetal and neonatal testes: a gapped landscape. *Front Endocrinol (Lausanne).* 2015; 6:58.
21. Moore DD, Kato S, Xie W, Mangelsdorf DJ, Schmidt DR, Xiao R, Kliewer SA: International Union of Pharmacology. LXII. The NR1H and NR1I Receptors: Constitutive Androstane Receptor, Pregnane X Receptor, Farnesoid X Receptor  $\alpha$ , Farnesoid X Receptor  $\beta$ , Liver X Receptor  $\alpha$ , Liver X Receptor  $\beta$ , and Vitamin D Receptor. *Pharmacol Rev.* 2006; 58 (4): 742-759.
22. Beltowski J, Semczuk A: Liver X receptor (LXR) and the reproductive system – a potential novel target for therapeutic intervention. *Pharmacol Rep.* 2010; 62(1): 15–27.

23. Høgmoen Åstrand OA, Gikling I, Sylte I, Rustan AC, Thoresen GH, Rongved P, Kase ET: Development of new LXR modulators that regulate LXR target genes and reduce lipogenesis in human cell models. *Eur J Med Chem.* 2014; 74(3): 258–263.
24. Reschly EJ, Ai N, Welsh WJ, Ekins S, Hagey LR, Krasowski MD: Ligand specificity and evolution of liver X receptors. *J Steroid Biochem Mol Biol.* 2008; 110(1–2): 83–94.
25. Michalik L, Auwerx J, Berger JP, Chatterjee VK, Glass CK, Gonzalez FJ, Grimaldi PA, Kadowaki T, Lazar MA, O'Rahilly S, Palmer CN, Plutzky J, Reddy JK, Spiegelman BM, Staels B, Wahli W: International Union of Pharmacology. LXI. Peroxisome Proliferator-Activated Receptors. *Pharmacol Rev.* 2006; 58(4): 726-741.
26. Lefebvre P, Benomar Y, Staels B: Retinoid X receptors: common heterodimerization partners with distinct functions. *Trends Endocrinol Metab.* 2010; 21(11): 676–683.
27. Thomas M, Sukhai MA, Kamel-Reid S: An emerging role for retinoid X receptor  $\alpha$  in malignant hematopoiesis. *Leuk Res.* 2012; 36(9): 1075-81.
28. Pérez E, Bourguet W, Gronemeyer H, de Lera AR: Modulation of RXR function through ligand design. *Biochimica et Biophysica Acta (BBA). Biochim Biophys Acta.* 2012; 1821(1): 57–69.
29. Germain P, Chambon P, Eichele G, Evans RM, Lazar MA, Leid M, De Lera AR, Lotan R, Mangelsdorf DJ, Gronemeyer H: International Union of Pharmacology. LXIII. Retinoid X Receptors. *Pharmacol Rev.* 2006; 58(4): 760-772.
30. Harvey CB, Williams GR: Mechanism of Thyroid Hormone Action. *Thyroid.* 2002; 12(6): 441-446.
31. Brent GA: Mechanisms of thyroid hormone action. *JCI* 2012; 122(9): 3035-3043.
32. Flamant F, Baxter JD, Forrest D, Refetoff S, Samuels H, Scanlan TS, Vennström B, Samarut J: International Union of Pharmacology. LIX. The Pharmacology and Classification of the Nuclear Receptor Superfamily: Thyroid Hormone Receptors. *Pharmacol Rev.* 2006; 58(4): 705-11.
33. Fuller PJ, Young MJ: Mechanisms of Mineralocorticoid Action. *Hypertension.* 2005; 46: 1227-1235.
34. Li X, O'Malley BW: Unfolding the Action of Progesterone Receptors. *J Biol Chem.* 2003; 278(41):39261-4.

35. Li X, Lonard DM, O'Malley BW: A contemporary understanding of progesterone receptor function. *Mech Ageing Dev.* 2004; 125(10–11): 669–678.
36. Germain P, Chambon P, Eichele G, Evans RM, Lazar MA, Leid M, De Lera AR, Lotan R, Mangelsdorf DJ, Gronemeyer H: International Union of Pharmacology. LX. Retinoic Acid Receptors. International Union of Pharmacology. LXIII. Retinoid X Receptors, *Pharmacol Rev.* 2006; 58(4): 712-725.
37. Krasowski MD, Ni A, Hagey LR, Ekins S: Evolution of promiscuous nuclear hormone receptors: LXR, FXR, VDR, PXR, and CAR. *Mol Cell Endocrinol.* 2011; 334(1–2): 39–48.
38. Gallastegui N, Mackinnon JA, Fletterick RJ, Estébanez-Perpiñá E: Advances in our structural understanding of orphan nuclear receptors. *Trends Biochem Sci.*, 2015; 40(1): 25-35.
39. Jetten AM, Ueda E: Retinoid-related orphan receptors (RORs): roles in cell survival, differentiation and disease. *Cell Death Differ.* 2002; 9(11): 1167-71.
40. Hecker M in Hollert H: Endocrine disruptor screening: regulatory perspectives and needs. *Environmental Sciences Europe: ESEU.* 2011; 23: 15.
41. Gelbke HP, Kayser M, Poole A: OECD test strategies and methods for endocrine disruptors. *Toxicology.* 2004; 205(1–2): 17–25.
42. OECD Work Related to Endocrine Disruptors [Dostop 1.6.2016]: <http://www.oecd.org/env/ehs/testing/oecdworkrelatedtoendocrinedisrupters.htm>.
43. Računalniški program Endocrine Disruptome [Dostopostop 1.6.2016]: <http://endocrinedisruptome.ki.si/>
44. VirtualToxLab, ocenjevanje toksičnosti zdravil, kemikalij in naravnih izdelkov: [Dostop 1.6.2016]: [http://www.biograf.ch/data/projects/virtualtoxlab\\_results.php](http://www.biograf.ch/data/projects/virtualtoxlab_results.php).
45. Vedani A, Smiesko M, Spreafico M, Peristera O, Dobler M: VirtualToxLab - in silico prediction of the toxic (endocrine-disrupting) potential of drugs, chemicals and natural products. Two years and 2,000 compounds of experience: a progress report. *ALTEX.* 2009; 26(3):167-76.
46. Mcule [Dostop 3.6.2016]: <https://mcule.com/apps/1-click-docking/>
47. Glide [Dostop 3.6.2016]: <http://www.schrodinger.com/Glide>

48. Plewczynski D, Łaźniewski M, von Grotthuss M, Rychlewski L, Ginalski K: VoteDock: consensus docking method for prediction of protein-ligand interactions. J Comput Chem. 2011; 32(4): 568-81.
49. CBZ [Dostop 14.5.2016]: [http://www.cbz.si/cbz/bazazdr2.nsf/Search/\\$searchForm?SearchView](http://www.cbz.si/cbz/bazazdr2.nsf/Search/$searchForm?SearchView)
50. Kolšek K, Mavri J, Sollner Dolenc M, Gobec S, Turk S: Endocrine disruptome--an open source prediction tool for assessing endocrine disruption potential through nuclear receptor binding. J Chem Inf Model. 2014; 54(4): 1254-67.
51. AutoDock Vina [Dostop 14.5.2016]: <http://vina.scripps.edu/>
52. Python [Dostop 14.5.2016]: <https://www.python.org/>
53. Django [Dostop 14.5.2016]: <https://www.djangoproject.com/>
54. Definicija HTML [Dostop 14.5.6.2016]: <http://www.merriam-webster.com/dictionary/html>
55. SMILES; poenostavljeni kemični jezik [Dostop 14.5.2016]: <http://www.daylight.com/dayhtml/doc/theory/theory.smiles.html>
56. Kaj je PAINS in zakaj je pomemben [Dostop 14.5.2016]: <http://chembiohub.ox.ac.uk/blog/2015/03/10/pains.html>
57. Baza podatkov DrugBank [Dostop 15.5.2016]: <http://www.drugbank.ca/>
58. Baza podatkov ChemSpider [Dostop 15.5.2016]: <http://www.chemspider.com/>
59. InChI [Dostop 15.5.2016]: <http://www.iupac.org/home/publications/e-resources/inchi.html>,
60. Gaulton A, Bellis LJ, Bento AP, Chambers J, Davies M, Hersey A, Light Y, McGlinchey S, Michalovich D, Al-Lazikani B, Overington JP: ChEMBL: a large-scale bioactivity database for drug discovery. Nucleic Acids Res. 2012; 40(Database issue): D1100–D1107.
61. ChEMBL napovedi temeljeni na vezavi liganda: [Dostop 15.5.2016]: <http://chembl.blogspot.hr/2014/04/ligand-based-target-predictions-in.html> ,
62. ChemOffice Professional [Dostop 15.5.2016]:
63. [https://www.cambridgesoft.com/Ensemble\\_for\\_Chemistry/ChemOffice/ChemOfficeProfessional/](https://www.cambridgesoft.com/Ensemble_for_Chemistry/ChemOffice/ChemOfficeProfessional/)



64. Strack D: ChemOffice Ultra 2000: CambridgeSoft, c/o CHEM Research GmbH, Frankfurt, DM 3,290. *Phytochemistry*. 2001; 57(1): 144.
65. Zhu W, Zeng N, Wang N: Sensitivity, Specificity, Accuracy, Associated Confidence Interval and ROC Analysis with Practical SAS ® Implementations. NESUG proceedings: health care and life sciences. 2010.
66. ChEMBL, testosterone: <https://www.ebi.ac.uk/chembl/compound/inspect/CHEMBL386630>
67. PubChem testosterone: <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/6013>
68. ChEMBL, ciproteronacetat [Dostop 10.5.2016]: <https://www.ebi.ac.uk/chembl/compound/inspect/CHEMBL139835>
69. Nguyen TV, Yao M, Pike CJ: Flutamide and cyproterone acetate exert agonist effects: induction of androgen receptor-dependent neuroprotection. *Endocrinology*. 2007; 148(6): 2936-43.
70. PubChem, ciproteron acetat [Dostop 10.5.2016]: <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/9880>
71. DrugBank, bicalutamid [Dostop 10.5.2016]: <http://www.drugbank.ca/drugs/DB01128>
72. Culig ZI, Hoffmann J, Erdel M, Eder IE, Hobisch A, Hittmair A, Bartsch G, Utermann G, Schneider MR, Parczyk K, Klocker H: Switch from antagonist to agonist of the androgen receptor blocker bicalutamide is associated with prostate tumour progression in a new model system. *Br J Cancer*. 1999; 81(2): 242-51.
73. ChEMBL, enzalutamid [Dostop 10.5.2016]: <https://www.ebi.ac.uk/chembl/compound/inspect/CHEMBL1082407>
74. Guerrero J, Alfaro IE, Gómez F, Protter AA, Bernales S: Enzalutamide, an androgen receptor signaling inhibitor, induces tumor regression in a mouse model of castration-resistant prostate cancer. *Prostate*. 2013; 73(12): 1291-305.
75. ChEMBL, etinilestradiol [Dostop 10.5.2016]: <https://www.ebi.ac.uk/chembl/compound/inspect/CHEMBL691>
76. Henríquez-Hernández LA, Flores-Morales A, Santana-Farré R, Axelson M, Nilsson P, Norstedt G, Fernández-Pérez: Role of Pituitary Hormones on 17 $\alpha$ -Ethinylestradiol-Induced Cholestasis in Rat. *JPET*. 2007; vol. 320 no. 2 695-705.

77. PubChem, etinilestradiol [Dostop 11.5.2016]:  
<https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/5991>
78. DrugBank, estradiol [Dostop 11.5.2016]:  
<https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/5757>
79. ChEMBL, estradiol [Dostop 11.5.2016]:  
<https://www.ebi.ac.uk/chembl/compound/inspect/CHEMBL135>
80. PubChem, estriol [Dostop 11.5.2016]:  
<https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/5756>
81. ChEMBL, estriol [Dostop 11.5.2016]:  
<https://www.ebi.ac.uk/chembl/compound/inspect/CHEMBL193482>
82. PubChem, klomifen [Dostop 11.5.2016]:  
<https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/1548953>
83. Kuiper GG, Carlsson B, Grandien K, Enmark E, Häggblad J, Nilsson S, Gustafsson JA: Comparison of the ligand binding specificity and transcript tissue distribution of estrogen receptors alpha and beta. *Endocrinology*. 1997; 138(3): 863-70.
84. PubChem, raloksifen [Dostop 11.5.2016]:  
<https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/5035>
85. PubChem, tamoksifen [Dostop 11.5.2016]:  
<https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/2733526>
86. DrugBank, toremifen [Dostop 11.5.2016]: <http://www.drugbank.ca/drugs/DB00539>
87. ChEMBL, toremifen [Dostop 11.5.2016]:  
<https://www.ebi.ac.uk/chembl/compound/inspect/CHEMBL1655>
88. Kawashima H, Tanaka T, Cheng JS, Sugita S, Ezaki K, Kurisu T, Nakatani T: Effect of anti-estrogens on the androgen receptor activity and cell proliferation in prostate cancer cells. *Urol Res*. 2004; 32(6): 406-10.
89. PubChem, fulvestrant [Dostop 13.5.2016]:  
<https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/104741>
90. PubChem, triamcinolon [Dostop 13.5.2016]:  
<https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/31307>
91. PubChem, hidrokortizon [Dostop 13.5.2016]:  
<https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/5754>

92. PubChem, betametazon [Dostop 13.5.2016]:  
<https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/9782>
93. ChEMBL, triamcinolon [Dostop 13.5.2016]:  
<https://www.ebi.ac.uk/chembl/compound/inspect/CHEMBL1451>
94. ChEMBL, betametazon [Dostop 13.5.2016]:  
<https://www.ebi.ac.uk/chembl/compound/inspect/CHEMBL632>
95. ChEMBL, flutikazon propionat [Dostop 13.5.2016]:  
<https://www.ebi.ac.uk/chembl/compound/inspect/CHEMBL1473>
96. Austin RJ, Maschera B, Walker A, Fairbairn L, Meldrum E, Farrow SN, Uings II: Mometasone furoate is a less specific glucocorticoid than fluticasone propionate. *Eur Respir J.* 2002; 20(6): 1386-92.
97. ChEMBL, mifepriston [Dostop 13.5.2016]:  
<https://www.ebi.ac.uk/chembl/compound/inspect/CHEMBL1276308>
98. Song LN, Coghlan M, Gelmann EP: Antiandrogen effects of mifepristone on coactivator and corepressor interactions with the androgen receptor. *Mol Endocrinol.* 2004; 18(1): 70-85.
99. PubChem, mifepriston [Dostop 13.5.2016]:  
<https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/55245>
100. ChEMBL, ciklesonid [Dostop 13.5.2016]:  
<https://www.ebi.ac.uk/chembl/compound/inspect/CHEMBL2040682>
101. Belvisi MG, Bundschuh DS, Stoeck M, Wicks S, Underwood S, Battram CH, Haddad el-B, Webber SE, Foster ML: Preclinical Profile of Ciclesonide, a Novel Corticosteroid for the Treatment of Asthma. *J Pharmacol Exp Ther.* 2005; 314(2): 568-74.
102. PubChem, ciklesonid [Dostop 13.5.2016]:  
<https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/6918155>
103. PubChem, ciklesonid qHTS test [Dostop 13.5.2016]:  
<https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/bioassay/743069>
104. ChEMBL, metilprednizolon [Dostop 13.5.2016]:  
<https://www.ebi.ac.uk/chembl/compound/inspect/CHEMBL650>

105. ChEMBL, flutikazon furoat [Dostop 13.5.2016]:  
<https://www.ebi.ac.uk/chembl/compound/inspect/CHEMBL1676>
106. ChEMBL, fluorometolon acetat [Dostop 13.5.2016]:  
<https://www.ebi.ac.uk/chembl/compound/inspect/CHEMBL1201064>
107. ChEMBL, mometazon [Dostop 13.5.2016]:  
<https://www.ebi.ac.uk/chembl/compound/inspect/CHEMBL1161>
108. ChEMBL, budezonid [Dostop 15.5.2016]:  
<https://www.ebi.ac.uk/chembl/compound/inspect/CHEMBL1370>
109. ChEMBL, alklometazon dipropionat [Dostop 15.5.2016]:  
<https://www.ebi.ac.uk/chembl/compound/inspect/CHEMBL1200989>
110. ChEMBL, beklometazon dipropionat [Dostop 15.5.2016]:  
<https://www.ebi.ac.uk/chembl/compound/inspect/CHEMBL1200500>
111. ChEMBL, loteprednol etabonat [Dostop 15.5.2016]:  
<https://www.ebi.ac.uk/chembl/compound/inspect/CHEMBL1200865>
112. ChEMBL, prednizon [Dostop 15.5.2016]:  
<https://www.ebi.ac.uk/chembl/compound/inspect/CHEMBL635>
113. PubChem, alklometazon dipropionat [Dostop 15.5.2016]:  
<https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/636374>
114. PubChem, beklometazon dipropionat [Dostop 15.5.2016]:  
<https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/21700>
115. PubChem, loteprednol etabonat [Dostop 13.5.2016]:  
<https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/444025>
116. PubChem, prednizon [Dostop 15.5.2016]:  
<https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/5865>
117. ChEMBL, deksametazon [Dostop 13.5.2016]:  
<https://www.ebi.ac.uk/chembl/compound/inspect/CHEMBL384467>
118. Svärd J, Blanco F, Nevin D, Fayne D, Mulcahy F, Hennessy M, Spiers JP: Differential interactions of antiretroviral agents with LXR, ER and GR nuclear receptors: potential contributing factors to adverse events. Br J Pharmacol. 2014; 171(2): 480–497.

119. PubChem, deksametazon [Dostop 13.5.2016]:  
<https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/5743>
120. ChEMBL, fenofibrat [Dostop 10.5.2016]:  
<https://www.ebi.ac.uk/chembl/compound/inspect/CHEMBL672>
121. ChEMBL, gemfibrozil [Dostop 10.5.2016]:  
<https://www.ebi.ac.uk/chembl/compound/inspect/CHEMBL457>
122. PubChem, fenofibrat [Dostop 10.5.2016]:  
<https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/3339>
123. PubChem, gemfibrozil [Dostop 10.5.2016]:  
<https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/3463>
124. ChEMBL, pioglitazon [Dostop 10.5.2016]:  
<https://www.ebi.ac.uk/chembl/compound/inspect/CHEMBL595>
125. Matthews L, Berry A, Tersigni M, D'Acquisto F, Ianaro A, Ray D:  
 Thiazolidinediones are partial agonists for the glucocorticoid receptor. *Endocrinology*.  
 2009; 150(1): 75-86.
126. PubChem, acitretin [Dostop 11.5.2016]:  
<https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/5284513>
127. ChEMBL, acitretin [Dostop 11.5.2016]:  
<https://www.ebi.ac.uk/chembl/compound/inspect/CHEMBL1131>
128. PubChem, alitretinoin [Dostop 11.5.2016]:  
<https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/449171>
129. DrugBank, levotiroksin [Dostop 11.5.2016]:  
<http://www.drugbank.ca/drugs/DB00451>
130. PubChem, liotironin [Dostop 11.5.2016]:  
<https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/5920>
131. PubChem, glibenklamid [Dostop 1.6.2016]:  
<https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/3488>
132. PubChem, glimepirid [Dostop 1.6.2016]:  
<https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/3476>
133. PubChem, glipizid [Dostop 1.6.2016]:  
<https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/3478>

134. PubChem, glikvidon [Dostop 1.6.2016]:  
<https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/91610>
135. PubChem, levonorgestrel [Dostop 1.6.2016]:  
<https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/13109>
136. ChEMBL, levonorgestrel [Dostop 1.6.2016]:  
<https://www.ebi.ac.uk/chembl/compound/inspect/CHEMBL1389>
137. Kumar N, Koide SS, Tsong Y, Sundaram K: Nestorone®: a progestin with a unique pharmacological profile. *Steroids*. 2000; 65(10-11): 629-36.
138. PubChem, levonorgestrel qHTS test [Dostop 1.6.2016]:  
<https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/bioassay/743079>
139. Rulcova A, Prokopova I, Krausova L, Bitman M, Vrzal R, Dvorak Z, Blahos J, Pavek P: Stereoselective interactions of warfarin enantiomers with the pregnane X nuclear receptor in gene regulation of major drug-metabolizing cytochrome P450 enzymes. *J Thromb Haemost*. 2010; 8(12): 2708-17.
140. PubChem, varfarin [Dostop 1.6.2016]:  
<https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/54678486>
141. ChEMBL, drospirenon: [Dostop 1.6.2016]:  
<https://www.ebi.ac.uk/chembl/compound/inspect/CHEMBL1509>
142. Fuhrmann U, Krattenmacher R, Slater EP, Fritzscheier KH: The novel progestin drospirenone and its natural counterpart progesterone: biochemical profile and antiandrogenic potential. *Contraception*. 1996; 54(4): 243-51.
143. PubChem, drospirenon [Dostop 1.6.2016]:  
<https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/68873>
144. ChEMBL, nebivolol [Dostop 1.6.2016]:  
<https://www.ebi.ac.uk/chembl/compound/inspect/CHEMBL434394>
145. Manthey D, Gamerdinger M, Behl C: The selective  $\beta$ 1-adrenoceptor antagonist nebivolol is a potential oestrogen receptor agonist with neuroprotective abilities. *Br J Pharmacol*. 2010; 159(6): 1264–1273.
146. Erbe DV, Gartrell K, Zhang YL, Suri V, Kirincich SJ, Will S, Perreault M, Wang S, Tobin JF: Molecular activation of PPAR $\gamma$  by angiotensin II type 1-receptor antagonists. *Vascul Pharmacol.*, 2006; 45(3): 154–162.

147. PubChem, kandesartan [Dostop 1.6.2016]:  
<https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/2541>
148. PubChem, telmisartan [Dostop 2.6.2016]:  
[:https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/65999](https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/65999)
149. Matthews L, Berry A, Tersigni M, D'Acquisto F, Ianaro A, Ray D: Thiazolidinediones are partial agonists for the glucocorticoid receptor. *Endocrinology*. 2009; 150(1): 75-86.
150. PubChem, ketokonazol [Dostop 2.6.2016]:  
<https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/456201>
151. Eil C: Ketoconazole binds to the human androgen receptor. *Horm Metab Res*. 1992; 24(8): 367-70.
152. Cheng F, Liu C, Jiang J, Lu W, Li W, Liu G, Zhou W, Huang J, Tang Y: Prediction of drug-target interactions and drug repositioning via network-based inference. *PLoS Comput Biol*. 2012; 8(5): e1002503.
153. Novotna A, Korhonova M, Bartonkova I, Soshilov AA, Denison MS, Bogdanova K, Kolar M, Bednar P, Dvorak Z: Enantiospecific effects of ketoconazole on aryl hydrocarbon receptor. *PLoS One*. 2014; 9(7): e101832.
154. PubChem, darunavir [Dostop 2.6.2016]:  
<https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/213039>
155. PubChem, maravirok [Dostop 2.6.2016]:  
<http://www.drugbank.ca/drugs/DB04835>
156. PubChem, tipranavir [Dostop 2.6.2016]:  
<https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/54682461>
157. Fan J, Shimizu Y, Chan J, Wilkinson A, Ito A, Tontonoz P, Dullaghan E, Galea LA, Pfeifer T, Wellington CL: Hormonal modulators of glial ABCA1 and apoE levels. *J Lipid Res*. 2013; 54: 3139–3150.
158. PubChem, didrogesteron [Dostop 2.6.2016]:  
<https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/9051>
159. Rižner TL, Brožič P, Doucette C, Turek-Etienne T, Müller-Vieira U, Sonneveld E, van der Burg B, Böcker C, Husen B: Selectivity and potency of the retroprogesterone dydrogesterone in vitro. *Steroids*. 2011; 76:607–615.

160. ChEMBL, didrogesteron: [Dostop 2.6.2016]:  
<https://www.ebi.ac.uk/chembl/compound/inspect/CHEMBL1200853>
161. PubChem, prasteron [Dostop 2.6.2016]:  
<https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/5881>
162. Chen F, Knecht K, Birzin E, Fisher J, Wilkinson H, Mojena M, Moreno CT, Schmidt A, Harada S, Freedman LP, Reszka AA: Direct agonist/antagonist functions of dehydroepiandrosterone. *Endocrinology*. 2005;146(11):4568-76.
163. ChEMBL, prasteron: [Dostop 2.6.2016]:  
<https://www.ebi.ac.uk/chembl/compound/inspect/CHEMBL90593>
164. PubChem, ritonavir [Dostop 2.6.2016]:  
<https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/392622>
165. Xiang J, Wang Y, Su K, Liu M, Hu PC, Ma T, Li JX, Wei L, Zheng Z, Yang F: Ritonavir binds to and downregulates estrogen receptors: molecular mechanism of promoting early atherosclerosis. *Exp Cell Res*. 2014; 327(2): 318-30.
166. Dussault I, Lin M, Hollister K, Wang EH, Synold TW, Forman BM: Peptide Mimetic HIV Protease Inhibitors Are Ligands for the Orphan Receptor SXR. *J Biol Chem*. 2001; 276(36): 33309-12.
167. Zhang B, MacNaul K, Szalkowski D, Li Z, Berger J, Moller DE: Inhibition of adipocyte differentiation by HIV protease inhibitors. *J Clin Endocrinol Metab*. 1999; 84(11): 4274-7.
168. Sun J, Yang L, Li M, Wang Z, Haynes A, Wang Q, Raplee I, Melchisedek J, Prasad A, Sneed KB, He L, Zhou S: Abstract 2040: Indication switching of the FDA-approved anticancer tyrosine kinase inhibitors to treat metabolic diseases. *Cancer Res*. 2013; 73: 2040.



# PRILOGE

## Priloga 1:

Spojina	Abakavir	Acetilcistein	Acetilsalicil na kislina	Aciklovir	Adefovirdip ivoksilat	Adrenalin	Agomelatin	Akarboza	Aksitinib	Alanine	Alendronsk a kislina
AR	AR : -7.7	AR : -4.7	AR : -6.1	AR : -5.8	AR : -4.4	AR : -6.3	AR : -7.8	AR : 7.4	AR : -0.4	AR : -3.9	AR : -5.2
AR an.	AR an.: -8.2	AR an.: -4.5	AR an.: -6.3	AR an.: -6.3	AR an.: -4.2	AR an.: -6.3	AR an.: -7.7	AR an.: 1.4	AR an.: 1.1	AR an.: -3.8	AR an.: -5.2
ER $\alpha$	ER $\alpha$ : -7.8	ER $\alpha$ : -4.3	ER $\alpha$ : -5.8	ER $\alpha$ : -6.3	ER $\alpha$ : -7.0	ER $\alpha$ : -6.0	ER $\alpha$ : -7.7	ER $\alpha$ : -6.2	ER $\alpha$ : -8.4	ER $\alpha$ : -3.7	ER $\alpha$ : -5.0
ER $\alpha$ an.	ER $\alpha$ an.: -7.6	ER $\alpha$ an.: -4.0	ER $\alpha$ an.: -5.7	ER $\alpha$ an.: -6.0	ER $\alpha$ an.: -7.4	ER $\alpha$ an.: -6.1	ER $\alpha$ an.: -7.2	ER $\alpha$ an.: -6.3	ER $\alpha$ an.: -8.9	ER $\alpha$ an.: -3.5	ER $\alpha$ an.: -4.9
ER $\beta$	ER $\beta$ : -7.6	ER $\beta$ : -4.3	ER $\beta$ : -6.2	ER $\beta$ : -5.7	ER $\beta$ : -5.3	ER $\beta$ : -5.9	ER $\beta$ : -7.7	ER $\beta$ : 1.6	ER $\beta$ : -3.7	ER $\beta$ : -3.9	ER $\beta$ : -5.0
ER $\beta$ an.	ER $\beta$ an.: -6.9	ER $\beta$ an.: -4.1	ER $\beta$ an.: -6.0	ER $\beta$ an.: -5.6	ER $\beta$ an.: -6.7	ER $\beta$ an.: -5.7	ER $\beta$ an.: -7.5	ER $\beta$ an.: -5.7	ER $\beta$ an.: -8.9	ER $\beta$ an.: -3.7	ER $\beta$ an.: -4.8
GR	GR: -7.9	GR: -4.5	GR: -6.2	GR: -5.8	GR: -7.7	GR: -6.3	GR: -8.0	GR: -7.1	GR: -10.6	GR: -3.8	GR: -5.0
GR an.	GR an.: -7.4	GR an.: -4.0	GR an.: -5.5	GR an.: -5.3	GR an.: -6.8	GR an.: -6.0	GR an.: -7.2	GR an.: -8.3	GR an.: -8.8	GR an.: -3.5	GR an.: -4.9
LXR $\alpha$	LXR $\alpha$ : -8.7	LXR $\alpha$ : -4.3	LXR $\alpha$ : -6.4	LXR $\alpha$ : -6.4	LXR $\alpha$ : -8.5	LXR $\alpha$ : -6.4	LXR $\alpha$ : -8.4	LXR $\alpha$ : -8.4	LXR $\alpha$ : -10.6	LXR $\alpha$ : -3.5	LXR $\alpha$ : -5.5
LXR $\beta$	LXR $\beta$ : -8.3	LXR $\beta$ : -4.4	LXR $\beta$ : -6.6	LXR $\beta$ : -6.2	LXR $\beta$ : -8.5	LXR $\beta$ : -6.4	LXR $\beta$ : -8.7	LXR $\beta$ : -7.4	LXR $\beta$ : -11.1	LXR $\beta$ : -3.6	LXR $\beta$ : -5.6
PPAR $\alpha$	PPAR $\alpha$ : -7.7	PPAR $\alpha$ : -4.3	PPAR $\alpha$ : -5.9	PPAR $\alpha$ : -5.9	PPAR $\alpha$ : -8.0	PPAR $\alpha$ : -5.7	PPAR $\alpha$ : -7.7	PPAR $\alpha$ : -6.5	PPAR $\alpha$ : -8.8	PPAR $\alpha$ : -3.7	PPAR $\alpha$ : -5.8
PPAR $\beta$	PPAR $\beta$ : -8.0	PPAR $\beta$ : -4.6	PPAR $\beta$ : -6.3	PPAR $\beta$ : -6.0	PPAR $\beta$ : -8.3	PPAR $\beta$ : -6.0	PPAR $\beta$ : -7.7	PPAR $\beta$ : -7.5	PPAR $\beta$ : -9.5	PPAR $\beta$ : -3.5	PPAR $\beta$ : -5.7
PPAR $\gamma$	PPAR $\gamma$ : -7.2	PPAR $\gamma$ : -3.9	PPAR $\gamma$ : -6.0	PPAR $\gamma$ : -6.0	PPAR $\gamma$ : -7.9	PPAR $\gamma$ : -5.8	PPAR $\gamma$ : -7.7	PPAR $\gamma$ : -6.9	PPAR $\gamma$ : -9.2	PPAR $\gamma$ : -3.5	PPAR $\gamma$ : -5.0
RXR $\alpha$	RXR $\alpha$ : -7.7	RXR $\alpha$ : -4.4	RXR $\alpha$ : -6.5	RXR $\alpha$ : -6.7	RXR $\alpha$ : -7.8	RXR $\alpha$ : -6.1	RXR $\alpha$ : -8.1	RXR $\alpha$ : -4.4	RXR $\alpha$ : -9.6	RXR $\alpha$ : -4.0	RXR $\alpha$ : -4.6
TR $\alpha$	TR $\alpha$ : -8.5	TR $\alpha$ : -4.3	TR $\alpha$ : -6.4	TR $\alpha$ : -6.6	TR $\alpha$ : -6.1	TR $\alpha$ : -6.6	TR $\alpha$ : -8.6	TR $\alpha$ : 1.0	TR $\alpha$ : -8.5	TR $\alpha$ : -4.1	TR $\alpha$ : -4.7
TR $\beta$	TR $\beta$ : -8.2	TR $\beta$ : -4.5	TR $\beta$ : -6.2	TR $\beta$ : -6.7	TR $\beta$ : -7.6	TR $\beta$ : -6.3	TR $\beta$ : -8.2	TR $\beta$ : 0.1	TR $\beta$ : -9.1	TR $\beta$ : -3.7	TR $\beta$ : -4.7

Spojina	Alfa-tokoferilacetat	Alfakalcidol	Aliskiren	Alogliptin	Alopurinol	Alprazolam	Alprostadil	Ambrisentan	Ambroksol	Amilmetakrezol	Amilorid
AR	AR : -3.3	AR : -2.6	AR : 0.1	AR : -5.7	AR : -5.6	AR : -4.2	AR : -5.4	AR : -4.9	AR : -6.9	AR : -7.1	AR : -6.2
AR an.	AR an.: -5.0	AR an.: -6.2	AR an.: -1.5	AR an.: -6.9	AR an.: -5.7	AR an.: -7.5	AR an.: -6.3	AR an.: -7.0	AR an.: -7.4	AR an.: -6.8	AR an.: -6.6
ER $\alpha$	ER $\alpha$ : -8.4	ER $\alpha$ : -8.1	ER $\alpha$ : -7.3	ER $\alpha$ : -8.4	ER $\alpha$ : -5.8	ER $\alpha$ : -8.4	ER $\alpha$ : -7.6	ER $\alpha$ : -8.3	ER $\alpha$ : -7.3	ER $\alpha$ : -6.3	ER $\alpha$ : -6.1
ER $\alpha$ an.	ER $\alpha$ an.: -7.8	ER $\alpha$ an.: -8.3	ER $\alpha$ an.: -7.0	ER $\alpha$ an.: -8.2	ER $\alpha$ an.: -5.4	ER $\alpha$ an.: -9.0	ER $\alpha$ an.: -7.1	ER $\alpha$ an.: -8.1	ER $\alpha$ an.: -7.2	ER $\alpha$ an.: -6.3	ER $\alpha$ an.: -5.9
ER $\beta$	ER $\beta$ : -5.8	ER $\beta$ : -3.4	ER $\beta$ : -2.4	ER $\beta$ : -7.9	ER $\beta$ : -5.9	ER $\beta$ : -8.5	ER $\beta$ : -7.2	ER $\beta$ : -6.8	ER $\beta$ : -6.9	ER $\beta$ : -6.6	ER $\beta$ : -5.9
ER $\beta$ an.	ER $\beta$ an.: -8.2	ER $\beta$ an.: -5.6	ER $\beta$ an.: -6.9	ER $\beta$ an.: -8.2	ER $\beta$ an.: -5.3	ER $\beta$ an.: -8.5	ER $\beta$ an.: -6.8	ER $\beta$ an.: -7.4	ER $\beta$ an.: -6.8	ER $\beta$ an.: -6.6	ER $\beta$ an.: -6.0
GR	GR: -9.0	GR: -8.3	GR: -8.5	GR: -7.6	GR: -5.3	GR: -8.3	GR: -7.7	GR: -8.7	GR: -7.2	GR: -6.4	GR: -6.3
GR an.	GR an.: -8.1	GR an.: -8.4	GR an.: -7.7	GR an.: -8.1	GR an.: -5.8	GR an.: -9.0	GR an.: -6.5	GR an.: -8.3	GR an.: -6.8	GR an.: -5.8	GR an.: -6.2
LXR $\alpha$	LXR $\alpha$ : -9.0	LXR $\alpha$ : -9.5	LXR $\alpha$ : -8.6	LXR $\alpha$ : -8.5	LXR $\alpha$ : -5.6	LXR $\alpha$ : -9.0	LXR $\alpha$ : -8.1	LXR $\alpha$ : -9.1	LXR $\alpha$ : -8.0	LXR $\alpha$ : -7.1	LXR $\alpha$ : -6.6
LXR $\beta$	LXR $\beta$ : -10.3	LXR $\beta$ : -10.7	LXR $\beta$ : -8.5	LXR $\beta$ : -8.2	LXR $\beta$ : -5.6	LXR $\beta$ : -7.5	LXR $\beta$ : -8.0	LXR $\beta$ : -10.1	LXR $\beta$ : -8.0	LXR $\beta$ : -7.3	LXR $\beta$ : -6.6
PPAR $\alpha$	PPAR $\alpha$ : -9.3	PPAR $\alpha$ : -6.5	PPAR $\alpha$ : -7.7	PPAR $\alpha$ : -7.0	PPAR $\alpha$ : -6.2	PPAR $\alpha$ : -7.9	PPAR $\alpha$ : -6.9	PPAR $\alpha$ : -7.7	PPAR $\alpha$ : -7.6	PPAR $\alpha$ : -6.1	PPAR $\alpha$ : -6.5
PPAR $\beta$	PPAR $\beta$ : -9.1	PPAR $\beta$ : -6.9	PPAR $\beta$ : -7.9	PPAR $\beta$ : -7.3	PPAR $\beta$ : -6.0	PPAR $\beta$ : -8.7	PPAR $\beta$ : -7.4	PPAR $\beta$ : -7.7	PPAR $\beta$ : -7.6	PPAR $\beta$ : -6.7	PPAR $\beta$ : -6.7
PPAR $\gamma$	PPAR $\gamma$ : -8.3	PPAR $\gamma$ : -7.7	PPAR $\gamma$ : -8.3	PPAR $\gamma$ : -8.5	PPAR $\gamma$ : -5.6	PPAR $\gamma$ : -8.3	PPAR $\gamma$ : -6.9	PPAR $\gamma$ : -7.8	PPAR $\gamma$ : -7.2	PPAR $\gamma$ : -7.0	PPAR $\gamma$ : -6.3
RXR $\alpha$	RXR $\alpha$ : -9.9	RXR $\alpha$ : -9.9	RXR $\alpha$ : -8.2	RXR $\alpha$ : -9.2	RXR $\alpha$ : -5.9	RXR $\alpha$ : -9.7	RXR $\alpha$ : -7.9	RXR $\alpha$ : -8.2	RXR $\alpha$ : -8.3	RXR $\alpha$ : -6.9	RXR $\alpha$ : -6.0
TR $\alpha$	TR $\alpha$ : -5.7	TR $\alpha$ : -7.1	TR $\alpha$ : -3.9	TR $\alpha$ : -4.6	TR $\alpha$ : -5.5	TR $\alpha$ : -7.8	TR $\alpha$ : -6.8	TR $\alpha$ : -5.6	TR $\alpha$ : -7.5	TR $\alpha$ : -7.1	TR $\alpha$ : -6.9
TR $\beta$	TR $\beta$ : -6.7	TR $\beta$ : -7.5	TR $\beta$ : -5.5	TR $\beta$ : -6.3	TR $\beta$ : -5.8	TR $\beta$ : -6.7	TR $\beta$ : -8.1	TR $\beta$ : -8.4	TR $\beta$ : -7.9	TR $\beta$ : -7.2	TR $\beta$ : -6.6

Spojina	Amiodaron	Amisulprid	Amitriptilin	Amlodipin	Amoksicilin	Anagrelid	Anastrozol	Anetol	Apomorfín	Apremilast	Arginin
AR	AR : 2.1	AR : -4.8	AR : -6.5	AR : -3.1	AR : -4.3	AR : -7.9	AR : -4.8	AR : -6.5	AR : -7.6	AR : -0.4	AR : -5.3
AR an.	AR an.: -2.7	AR an.: -6.2	AR an.: -7.6	AR an.: -6.3	AR an.: -7.5	AR an.: -7.6	AR an.: -6.3	AR an.: -6.5	AR an.: -8.1	AR an.: -5.6	AR an.: -5.7
ER $\alpha$	ER $\alpha$ : -5.4	ER $\alpha$ : -6.7	ER $\alpha$ : -9.2	ER $\alpha$ : -7.5	ER $\alpha$ : -7.3	ER $\alpha$ : -7.9	ER $\alpha$ : -7.0	ER $\alpha$ : -5.6	ER $\alpha$ : -8.3	ER $\alpha$ : -4.4	ER $\alpha$ : -5.3
ER $\alpha$ an.	ER $\alpha$ an.: -6.5	ER $\alpha$ an.: -7.0	ER $\alpha$ an.: -8.9	ER $\alpha$ an.: -6.7	ER $\alpha$ an.: -6.7	ER $\alpha$ an.: -7.4	ER $\alpha$ an.: -7.3	ER $\alpha$ an.: -5.6	ER $\alpha$ an.: -7.8	ER $\alpha$ an.: -6.6	ER $\alpha$ an.: -5.1
ER $\beta$	ER $\beta$ : -0.2	ER $\beta$ : -6.1	ER $\beta$ : -8.1	ER $\beta$ : -6.3	ER $\beta$ : -4.3	ER $\beta$ : -8.1	ER $\beta$ : -6.6	ER $\beta$ : -5.9	ER $\beta$ : -8.5	ER $\beta$ : -3.1	ER $\beta$ : -4.7
ER $\beta$ an.	ER $\beta$ an.: -7.2	ER $\beta$ an.: -7.2	ER $\beta$ an.: -9.2	ER $\beta$ an.: -7.1	ER $\beta$ an.: -6.5	ER $\beta$ an.: -7.4	ER $\beta$ an.: -6.9	ER $\beta$ an.: -5.6	ER $\beta$ an.: -8.8	ER $\beta$ an.: -7.6	ER $\beta$ an.: -5.0
GR	GR: -8.4	GR: -7.2	GR: -8.4	GR: -7.7	GR: -9.1	GR: -7.6	GR: -6.1	GR: -6.1	GR: -8.6	GR: -7.4	GR: -5.1
GR an.	GR an.: -7.9	GR an.: -6.7	GR an.: -8.2	GR an.: -6.9	GR an.: -8.1	GR an.: -7.0	GR an.: -6.7	GR an.: -5.6	GR an.: -8.6	GR an.: -8.1	GR an.: -5.3
LXR $\alpha$	LXR $\alpha$ : -7.2	LXR $\alpha$ : -7.7	LXR $\alpha$ : -10.1	LXR $\alpha$ : -6.5	LXR $\alpha$ : -9.1	LXR $\alpha$ : -8.1	LXR $\alpha$ : -8.2	LXR $\alpha$ : -6.5	LXR $\alpha$ : -9.5	LXR $\alpha$ : -8.0	LXR $\alpha$ : -5.2
LXR $\beta$	LXR $\beta$ : -8.1	LXR $\beta$ : -8.3	LXR $\beta$ : -10.2	LXR $\beta$ : -7.3	LXR $\beta$ : -9.6	LXR $\beta$ : -8.6	LXR $\beta$ : -7.9	LXR $\beta$ : -6.5	LXR $\beta$ : -9.2	LXR $\beta$ : -9.3	LXR $\beta$ : -5.5
PPAR $\alpha$	PPAR $\alpha$ : -7.2	PPAR $\alpha$ : -7.5	PPAR $\alpha$ : -8.5	PPAR $\alpha$ : -7.0	PPAR $\alpha$ : -7.2	PPAR $\alpha$ : -6.9	PPAR $\alpha$ : -7.5	PPAR $\alpha$ : -5.9	PPAR $\alpha$ : -8.3	PPAR $\alpha$ : -7.2	PPAR $\alpha$ : -5.1
PPAR $\beta$	PPAR $\beta$ : -8.8	PPAR $\beta$ : -7.2	PPAR $\beta$ : -8.1	PPAR $\beta$ : -7.0	PPAR $\beta$ : -8.4	PPAR $\beta$ : -7.3	PPAR $\beta$ : -6.6	PPAR $\beta$ : -6.0	PPAR $\beta$ : -8.0	PPAR $\beta$ : -7.7	PPAR $\beta$ : -5.3
PPAR $\gamma$	PPAR $\gamma$ : -8.4	PPAR $\gamma$ : -6.7	PPAR $\gamma$ : -7.9	PPAR $\gamma$ : -6.0	PPAR $\gamma$ : -6.6	PPAR $\gamma$ : -7.3	PPAR $\gamma$ : -7.0	PPAR $\gamma$ : -6.2	PPAR $\gamma$ : -8.8	PPAR $\gamma$ : -7.6	PPAR $\gamma$ : -5.2
RXR $\alpha$	RXR $\alpha$ : -7.1	RXR $\alpha$ : -7.3	RXR $\alpha$ : -9.6	RXR $\alpha$ : -6.8	RXR $\alpha$ : -8.3	RXR $\alpha$ : -7.8	RXR $\alpha$ : -8.3	RXR $\alpha$ : -6.2	RXR $\alpha$ : -9.6	RXR $\alpha$ : -7.8	RXR $\alpha$ : -5.2
TR $\alpha$	TR $\alpha$ : -5.7	TR $\alpha$ : -5.5	TR $\alpha$ : -8.7	TR $\alpha$ : -4.4	TR $\alpha$ : -6.1	TR $\alpha$ : -7.3	TR $\alpha$ : -5.8	TR $\alpha$ : -6.7	TR $\alpha$ : -7.9	TR $\alpha$ : -4.2	TR $\alpha$ : -5.8
TR $\beta$	TR $\beta$ : -6.3	TR $\beta$ : -6.4	TR $\beta$ : -9.7	TR $\beta$ : -5.8	TR $\beta$ : -7.4	TR $\beta$ : -7.1	TR $\beta$ : -6.3	TR $\beta$ : -6.3	TR $\beta$ : -8.5	TR $\beta$ : -5.5	TR $\beta$ : -5.8

Spojina	Aripiprazol	Artikainijev klorid	Asparagine	Asparaginsk a kislina	Atazanavir	Atenolol	Atomokseti n	Atorvastatin	Avanafil	Azacitidin	Azatioprin
AR	AR : -5.3	AR : -6.6	AR : -4.8	AR : -4.7	AR : 3.9	AR : -7.1	AR : -7.3	AR : 7.9	AR : -1.1	AR : -6.8	AR : -7.0
AR an.	AR an.: -6.0	AR an.: -6.5	AR an.: -4.6	AR an.: -4.3	AR an.: 2.3	AR an.: -7.6	AR an.: -8.0	AR an.: 1.0	AR an.: -4.9	AR an.: -6.8	AR an.: -7.2
ER $\alpha$	ER $\alpha$ : -8.8	ER $\alpha$ : -6.6	ER $\alpha$ : -4.9	ER $\alpha$ : -4.4	ER $\alpha$ : -7.5	ER $\alpha$ : -7.0	ER $\alpha$ : -8.0	ER $\alpha$ : -4.1	ER $\alpha$ : -7.7	ER $\alpha$ : -6.5	ER $\alpha$ : -7.2
ER $\alpha$ an.	ER $\alpha$ an.: -8.4	ER $\alpha$ an.: -6.2	ER $\alpha$ an.: -4.8	ER $\alpha$ an.: -4.0	ER $\alpha$ an.: -9.0	ER $\alpha$ an.: -6.9	ER $\alpha$ an.: -7.7	ER $\alpha$ an.: -7.3	ER $\alpha$ an.: -7.8	ER $\alpha$ an.: -6.5	ER $\alpha$ an.: -6.9
ER $\beta$	ER $\beta$ : -6.3	ER $\beta$ : -6.9	ER $\beta$ : -5.0	ER $\beta$ : -4.7	ER $\beta$ : 5.0	ER $\beta$ : -7.2	ER $\beta$ : -7.9	ER $\beta$ : 2.2	ER $\beta$ : -4.7	ER $\beta$ : -6.4	ER $\beta$ : -7.2
ER $\beta$ an.	ER $\beta$ an.: -7.9	ER $\beta$ an.: -5.9	ER $\beta$ an.: -4.5	ER $\beta$ an.: -4.0	ER $\beta$ an.: -7.5	ER $\beta$ an.: -6.5	ER $\beta$ an.: -7.9	ER $\beta$ an.: -6.1	ER $\beta$ an.: -7.2	ER $\beta$ an.: -6.4	ER $\beta$ an.: -6.5
GR	GR: -8.5	GR: -6.3	GR: -4.6	GR: -5.0	GR: -5.9	GR: -7.5	GR: -7.4	GR: -6.3	GR: -8.0	GR: -6.4	GR: -7.0
GR an.	GR an.: -8.8	GR an.: -5.7	GR an.: -4.5	GR an.: -4.2	GR an.: -8.6	GR an.: -6.7	GR an.: -6.9	GR an.: -8.0	GR an.: -8.2	GR an.: -5.9	GR an.: -6.2
LXR $\alpha$	LXR $\alpha$ : -10.2	LXR $\alpha$ : -6.8	LXR $\alpha$ : -4.4	LXR $\alpha$ : -4.2	LXR $\alpha$ : -7.1	LXR $\alpha$ : -7.0	LXR $\alpha$ : -8.6	LXR $\alpha$ : -6.1	LXR $\alpha$ : -8.6	LXR $\alpha$ : -6.5	LXR $\alpha$ : -7.1
LXR $\beta$	LXR $\beta$ : -10.9	LXR $\beta$ : -6.9	LXR $\beta$ : -4.3	LXR $\beta$ : -4.2	LXR $\beta$ : -6.6	LXR $\beta$ : -7.3	LXR $\beta$ : -8.5	LXR $\beta$ : -6.2	LXR $\beta$ : -9.1	LXR $\beta$ : -7.0	LXR $\beta$ : -7.5
PPAR $\alpha$	PPAR $\alpha$ : -9.7	PPAR $\alpha$ : -6.4	PPAR $\alpha$ : -4.7	PPAR $\alpha$ : -4.2	PPAR $\alpha$ : -8.5	PPAR $\alpha$ : -7.4	PPAR $\alpha$ : -7.4	PPAR $\alpha$ : -6.7	PPAR $\alpha$ : -9.0	PPAR $\alpha$ : -6.6	PPAR $\alpha$ : -6.9
PPAR $\beta$	PPAR $\beta$ : -9.9	PPAR $\beta$ : -6.0	PPAR $\beta$ : -4.6	PPAR $\beta$ : -4.2	PPAR $\beta$ : -8.7	PPAR $\beta$ : -7.2	PPAR $\beta$ : -8.0	PPAR $\beta$ : -5.9	PPAR $\beta$ : -9.0	PPAR $\beta$ : -6.7	PPAR $\beta$ : -6.8
PPAR $\gamma$	PPAR $\gamma$ : -9.2	PPAR $\gamma$ : -6.4	PPAR $\gamma$ : -4.4	PPAR $\gamma$ : -4.1	PPAR $\gamma$ : -8.3	PPAR $\gamma$ : -7.2	PPAR $\gamma$ : -7.4	PPAR $\gamma$ : -7.8	PPAR $\gamma$ : -8.6	PPAR $\gamma$ : -5.9	PPAR $\gamma$ : -6.4
RXR $\alpha$	RXR $\alpha$ : -10.5	RXR $\alpha$ : -6.4	RXR $\alpha$ : -4.6	RXR $\alpha$ : -4.6	RXR $\alpha$ : -3.5	RXR $\alpha$ : -7.2	RXR $\alpha$ : -8.0	RXR $\alpha$ : -7.9	RXR $\alpha$ : -8.8	RXR $\alpha$ : -5.9	RXR $\alpha$ : -6.7
TR $\alpha$	TR $\alpha$ : -6.2	TR $\alpha$ : -6.6	TR $\alpha$ : -4.8	TR $\alpha$ : -4.3	TR $\alpha$ : 5.5	TR $\alpha$ : -7.7	TR $\alpha$ : -8.5	TR $\alpha$ : 5.3	TR $\alpha$ : -6.5	TR $\alpha$ : -6.0	TR $\alpha$ : -7.2
TR $\beta$	TR $\beta$ : -7.2	TR $\beta$ : -6.5	TR $\beta$ : -5.0	TR $\beta$ : -4.1	TR $\beta$ : 2.4	TR $\beta$ : -7.5	TR $\beta$ : -7.9	TR $\beta$ : 1.1	TR $\beta$ : -6.0	TR $\beta$ : -6.7	TR $\beta$ : -7.3

Spojina	Azelainska kislina	Azelastin	Azitromicin	Aztreonam	Bedakilin	Bendamusti njev klorid	Benfotiamin	Benserazid	Benzalkonij ev klorid	Benzidamin	Benzil benzoat
AR	AR an.: -6.0	AR : 2.5	AR : 45.6	AR : -4.3	AR : 8.7	AR : -5.8	AR : -3.9	AR : -7.1	AR : -6.5	AR : -6.8	AR : -7.3
AR an.	AR : -5.2	AR an.: -2.5	AR an.: 35.0	AR an.: -6.6	AR an.: 3.5	AR an.: -6.1	AR an.: -5.7	AR an.: -6.9	AR an.: -7.0	AR an.: -7.2	AR an.: -7.2
ER $\alpha$	ER $\alpha$ : -5.0	ER $\alpha$ : -6.7	ER $\alpha$ : -2.5	ER $\alpha$ : -6.5	ER $\alpha$ : -6.1	ER $\alpha$ : -6.1	ER $\alpha$ : -7.9	ER $\alpha$ : -6.7	ER $\alpha$ : -6.9	ER $\alpha$ : -8.5	ER $\alpha$ : -7.7
ER $\alpha$ an.	ER $\alpha$ an.: -4.9	ER $\alpha$ an.: -9.2	ER $\alpha$ an.: -5.5	ER $\alpha$ an.: -7.6	ER $\alpha$ an.: -7.4	ER $\alpha$ an.: -6.6	ER $\alpha$ an.: -7.3	ER $\alpha$ an.: -6.5	ER $\alpha$ an.: -6.8	ER $\alpha$ an.: -8.1	ER $\alpha$ an.: -7.5
ER $\beta$	ER $\beta$ : -5.5	ER $\beta$ : -1.7	ER $\beta$ : 39.8	ER $\beta$ : -5.9	ER $\beta$ : 2.1	ER $\beta$ : -5.1	ER $\beta$ : -5.7	ER $\beta$ : -6.7	ER $\beta$ : -6.9	ER $\beta$ : -7.2	ER $\beta$ : -7.8
ER $\beta$ an.	ER $\beta$ an.: -5.3	ER $\beta$ an.: -8.8	ER $\beta$ an.: -5.6	ER $\beta$ an.: -7.1	ER $\beta$ an.: -7.9	ER $\beta$ an.: -6.5	ER $\beta$ an.: -6.8	ER $\beta$ an.: -6.6	ER $\beta$ an.: -6.7	ER $\beta$ an.: -7.9	ER $\beta$ an.: -7.4
GR	GR: -5.5	GR: -8.2	GR: 11.9	GR: -6.7	GR: -6.5	GR: -7.6	GR: -7.8	GR: -6.4	GR: -6.6	GR: -8.2	GR: -7.2
GR an.	GR an.: -4.8	GR an.: -9.0	GR an.: -6.2	GR an.: -7.4	GR an.: -9.3	GR an.: -6.2	GR an.: -7.7	GR an.: -6.6	GR an.: -5.7	GR an.: -7.4	GR an.: -6.9
LXR $\alpha$	LXR $\alpha$ : -5.5	LXR $\alpha$ : -10.8	LXR $\alpha$ : -2.6	LXR $\alpha$ : -8.2	LXR $\alpha$ : -6.1	LXR $\alpha$ : -7.6	LXR $\alpha$ : -8.6	LXR $\alpha$ : -6.9	LXR $\alpha$ : -7.2	LXR $\alpha$ : -9.2	LXR $\alpha$ : -7.8

LXR β	LXR β: -5.3	LXR β: -10.9	LXR β: 11.2	LXR β: -8.1	LXR β: -8.6	LXR β: -7.8	LXR β: -9.0	LXR β: -6.6	LXR β: -7.3	LXR β: -8.6	LXR β: -8.2
PPAR α	PPAR α: -5.4	PPAR α: -9.0	PPAR α: 3.3	PPAR α: -7.3	PPAR α: -7.2	PPAR α: -6.7	PPAR α: -7.5	PPAR α: -6.9	PPAR α: -6.4	PPAR α: -8.2	PPAR α: -7.9
PPAR β	PPAR β: -5.1	PPAR β: -10.2	PPAR β: 4.4	PPAR β: -7.2	PPAR β: -6.8	PPAR β: -7.2	PPAR β: -8.1	PPAR β: -6.7	PPAR β: -7.1	PPAR β: -8.6	PPAR β: -8.1
PPAR γ	PPAR γ: -5.6	PPAR γ: -9.0	PPAR γ: -0.6	PPAR γ: -7.8	PPAR γ: -8.1	PPAR γ: -6.6	PPAR γ: -7.6	PPAR γ: -6.4	PPAR γ: -6.6	PPAR γ: -8.3	PPAR γ: -8.0
RXR α	RXR α: -6.3	RXR α: -9.2	RXR α: 9.2	RXR α: -8.2	RXR α: -8.4	RXR α: -7.7	RXR α: -8.9	RXR α: -7.0	RXR α: -7.7	RXR α: -8.9	RXR α: -8.5
TR α	TR α: -5.8	TR α: -4.9	TR α: 35.2	TR α: -5.8	TR α: 1.3	TR α: -6.9	TR α: -5.1	TR α: -7.7	TR α: -6.8	TR α: -9.3	TR α: -8.3
TR β	TR β: -5.8	TR β: -8.4	TR β: 24.6	TR β: -7.4	TR β: -2.2	TR β: -7.4	TR β: -6.9	TR β: -7.0	TR β: -7.3	TR β: -9.0	TR β: -8.0

Spojina	Benzoil peroksid	Benzokain	Betahistin	Betain	Betakaroten	Betaksolol	Bilastin	Bimatoprost	Biotin (vit. H)	Bisakodil	Bisoprolol
AR	AR : -7.0	AR : -5.8	AR : -5.1	AR : -4.1	AR : 46.9	AR : -6.7	AR : -1.7	AR : -4.4	AR : -7.2	AR : -2.6	AR : -6.5
AR an.	AR an.: -7.4	AR an.: -6.0	AR an.: -5.7	AR an.: -3.8	AR an.: 28.1	AR an.: -7.0	AR an.: -2.7	AR an.: -6.6	AR an.: -6.4	AR an.: -2.1	AR an.: -6.7
ER α	ER α: -7.0	ER α: -6.0	ER α: -4.8	ER α: -3.1	ER α: -2.1	ER α: -7.0	ER α: -8.2	ER α: -8.4	ER α: -6.2	ER α: -8.5	ER α: -6.5
ER α an.	ER α an.: -7.8	ER α an.: -6.0	ER α an.: -4.7	ER α an.: -3.3	ER α an.: 3.7	ER α an.: -6.8	ER α an.: -9.0	ER α an.: -8.5	ER α an.: -6.2	ER α an.: -8.6	ER α an.: -6.9
ER β	ER β: -7.5	ER β: -5.9	ER β: -4.9	ER β: -3.7	ER β: 40.7	ER β: -7.0	ER β: -2.7	ER β: -6.2	ER β: -6.8	ER β: -1.5	ER β: -6.7
ER β an.	ER β an.: -7.7	ER β an.: -6.1	ER β an.: -4.9	ER β an.: -3.4	ER β an.: -5.9	ER β an.: -6.3	ER β an.: -8.1	ER β an.: -7.2	ER β an.: -6.0	ER β an.: -7.9	ER β an.: -5.9
GR	GR: -6.6	GR: -6.0	GR: -5.0	GR: -3.7	GR: -3.7	GR: -6.6	GR: -9.4	GR: -8.9	GR: -6.5	GR: -8.8	GR: -7.3
GR an.	GR an.: -6.0	GR an.: -5.8	GR an.: -4.8	GR an.: -3.5	GR an.: -6.0	GR an.: -6.5	GR an.: -8.7	GR an.: -7.4	GR an.: -6.1	GR an.: -8.4	GR an.: -6.2
LXR α	LXR α: -7.4	LXR α: -5.9	LXR α: -5.7	LXR α: -3.5	LXR α: 10.5	LXR α: -7.6	LXR α: -9.4	LXR α: -8.9	LXR α: -6.3	LXR α: -10.6	LXR α: -7.2
LXR β	LXR β: -7.8	LXR β: -6.3	LXR β: -5.4	LXR β: -3.6	LXR β: 6.2	LXR β: -7.4	LXR β: -11.0	LXR β: -9.6	LXR β: -6.6	LXR β: -9.8	LXR β: -7.5
PPAR α	PPAR α: -8.2	PPAR α: -5.8	PPAR α: -4.8	PPAR α: -3.3	PPAR α: -8.8	PPAR α: -6.5	PPAR α: -9.1	PPAR α: -7.6	PPAR α: -6.4	PPAR α: -8.0	PPAR α: -6.6
PPAR β	PPAR β: -8.2	PPAR β: -6.0	PPAR β: -5.3	PPAR β: -3.4	PPAR β: -3.4	PPAR β: -7.7	PPAR β: -7.8	PPAR β: -9.3	PPAR β: -6.5	PPAR β: -8.8	PPAR β: -7.1
PPAR γ	PPAR γ: -8.5	PPAR γ: -5.8	PPAR γ: -5.1	PPAR γ: -3.4	PPAR γ: 7.3	PPAR γ: -6.5	PPAR γ: -8.8	PPAR γ: -8.6	PPAR γ: -6.7	PPAR γ: -9.0	PPAR γ: -6.8
RXR α	RXR α: -7.3	RXR α: -6.0	RXR α: -5.1	RXR α: -3.5	RXR α: 23.3	RXR α: -7.2	RXR α: -9.3	RXR α: -9.5	RXR α: -7.3	RXR α: -10.1	RXR α: -6.9
TR α	TR α: -8.3	TR α: -6.4	TR α: -5.5	TR α: -3.4	TR α: 8.2	TR α: -7.6	TR α: -4.1	TR α: -7.9	TR α: -6.1	TR α: -5.2	TR α: -7.6
TR β	TR β: -8.2	TR β: -6.1	TR β: -5.4	TR β: -3.5	TR β: 15.2	TR β: -7.2	TR β: -5.4	TR β: -8.8	TR β: -6.5	TR β: -7.4	TR β: -7.5

Spojina	Boceprevir	Borneol	Bosentan	Bosutinib	Brimonidin	Brinzolamid	Brivudin	Bromazepam	Bromfenak	Bromheksin	Bromokriptin
AR	AR : 5.4	AR : -6.0	AR : 5.1	AR : -1.8	AR : -7.1	AR : -5.5	AR : -6.9	AR : -3.8	AR : -7.1	AR : -6.8	AR : 26.2
AR an.	AR an.: 0.6	AR an.: -6.2	AR an.: 3.1	AR an.: -2.0	AR an.: -7.0	AR an.: -5.6	AR an.: -6.7	AR an.: -7.3	AR an.: -7.6	AR an.: -7.6	AR an.: 22.0
ER α	ER α: -4.2	ER α: -6.0	ER α: -6.6	ER α: -6.3	ER α: -7.2	ER α: -6.5	ER α: -6.9	ER α: -8.2	ER α: -8.3	ER α: -7.4	ER α: -5.4
ER α an.	ER α an.: -6.6	ER α an.: -5.8	ER α an.: -8.3	ER α an.: -7.4	ER α an.: -7.3	ER α an.: -6.8	ER α an.: -7.1	ER α an.: -8.2	ER α an.: -7.5	ER α an.: -7.0	ER α an.: -7.8
ER β	ER β: 1.1	ER β: -5.9	ER β: 3.4	ER β: -3.3	ER β: -7.1	ER β: -5.9	ER β: -6.1	ER β: -8.2	ER β: -7.1	ER β: -6.9	ER β: 20.3
ER β an.	ER β an.: -5.6	ER β an.: -5.7	ER β an.: -7.4	ER β an.: -7.1	ER β an.: -6.9	ER β an.: -5.4	ER β an.: -6.5	ER β an.: -8.4	ER β an.: -7.6	ER β an.: -6.5	ER β an.: -7.1
GR	GR: -6.5	GR: -5.4	GR: -7.9	GR: -8.5	GR: -7.2	GR: -7.3	GR: -7.3	GR: -7.6	GR: -8.0	GR: -7.3	GR: 6.2
GR an.	GR an.: -7.5	GR an.: -5.2	GR an.: -9.0	GR an.: -8.4	GR an.: -6.4	GR an.: -6.2	GR an.: -6.3	GR an.: -7.8	GR an.: -7.1	GR an.: -6.7	GR an.: -9.0
LXR α	LXR α: -6.2	LXR α: -6.7	LXR α: -8.2	LXR α: -8.8	LXR α: -7.5	LXR α: -7.2	LXR α: -7.6	LXR α: -9.0	LXR α: -9.1	LXR α: -8.0	LXR α: -6.8
LXR β	LXR β: -8.3	LXR β: -6.4	LXR β: -8.9	LXR β: -9.1	LXR β: -7.8	LXR β: -7.2	LXR β: -8.4	LXR β: -8.0	LXR β: -8.7	LXR β: -8.7	LXR β: -3.0
PPAR α	PPAR α: -6.3	PPAR α: -5.3	PPAR α: -7.9	PPAR α: -8.8	PPAR α: -7.0	PPAR α: -7.1	PPAR α: -7.5	PPAR α: -7.9	PPAR α: -8.1	PPAR α: -7.5	PPAR α: -1.6
PPAR β	PPAR β: -6.0	PPAR β: -5.7	PPAR β: -8.4	PPAR β: -7.8	PPAR β: -7.2	PPAR β: -6.7	PPAR β: -7.1	PPAR β: -7.9	PPAR β: -8.0	PPAR β: -7.5	PPAR β: -6.9
PPAR γ	PPAR γ: -6.8	PPAR γ: -4.3	PPAR γ: -8.6	PPAR γ: -8.6	PPAR γ: -6.3	PPAR γ: -6.1	PPAR γ: -6.7	PPAR γ: -7.7	PPAR γ: -7.4	PPAR γ: -7.0	PPAR γ: -7.2
RXR α	RXR α: -4.9	RXR α: -6.1	RXR α: -7.5	RXR α: -7.2	RXR α: -7.0	RXR α: -6.0	RXR α: -7.2	RXR α: -7.7	RXR α: -8.4	RXR α: -7.7	RXR α: 2.8
TR α	TR α: 1.7	TR α: -5.9	TR α: -5.0	TR α: -2.9	TR α: -8.4	TR α: -6.3	TR α: -6.1	TR α: -6.6	TR α: -8.8	TR α: -7.2	TR α: 16.9
TR β	TR β: -3.6	TR β: -6.0	TR β: -4.3	TR β: -2.7	TR β: -8.1	TR β: -6.7	TR β: -6.4	TR β: -7.7	TR β: -9.2	TR β: -8.0	TR β: 8.9

Spojina	Bupivakain	Buprenorfin	Bupropion	Busulfan	Butamirat	Butilskopolamin	Cefadroksil	Cefaklor	Cefazolin	Cefepim	Cefiksims
AR	AR : -7.0	AR : 0.8	AR : -6.7	AR : -5.6	AR : -6.6	AR : -6.3	AR : -6.7	AR : -6.6	AR : -4.1	AR : 0.0	AR : -3.8
AR an.	AR an.: -8.0	AR an.: -1.2	AR an.: -6.6	AR an.: -5.1	AR an.: -7.0	AR an.: -7.7	AR an.: -7.1	AR an.: -6.7	AR an.: -3.7	AR an.: -2.0	AR an.: -5.1
ER $\alpha$	ER $\alpha$ : -8.5	ER $\alpha$ : -4.6	ER $\alpha$ : -6.8	ER $\alpha$ : -4.7	ER $\alpha$ : -6.8	ER $\alpha$ : -7.0	ER $\alpha$ : -8.5	ER $\alpha$ : -8.1	ER $\alpha$ : -7.1	ER $\alpha$ : -4.4	ER $\alpha$ : -6.0
ER $\alpha$ an.	ER $\alpha$ an.: -8.3	ER $\alpha$ an.: -7.3	ER $\alpha$ an.: -6.9	ER $\alpha$ an.: -4.9	ER $\alpha$ an.: -6.6	ER $\alpha$ an.: -7.1	ER $\alpha$ an.: -7.0	ER $\alpha$ an.: -6.7	ER $\alpha$ an.: -5.9	ER $\alpha$ an.: -5.9	ER $\alpha$ an.: -5.9
ER $\beta$	ER $\beta$ : -7.4	ER $\beta$ : 2.1	ER $\beta$ : -6.9	ER $\beta$ : -5.1	ER $\beta$ : -6.8	ER $\beta$ : -6.4	ER $\beta$ : -6.8	ER $\beta$ : -6.6	ER $\beta$ : -4.5	ER $\beta$ : -1.3	ER $\beta$ : -3.3
ER $\beta$ an.	ER $\beta$ an.: -8.3	ER $\beta$ an.: -6.0	ER $\beta$ an.: -7.1	ER $\beta$ an.: -4.6	ER $\beta$ an.: -6.3	ER $\beta$ an.: -7.2	ER $\beta$ an.: -6.9	ER $\beta$ an.: -6.9	ER $\beta$ an.: -5.9	ER $\beta$ an.: -6.1	ER $\beta$ an.: -6.1
GR	GR: -7.9	GR: -6.8	GR: -6.8	GR: -5.4	GR: -7.2	GR: -8.1	GR: -9.2	GR: -8.9	GR: -8.7	GR: -7.2	GR: -7.3
GR an.	GR an.: -7.6	GR an.: -8.6	GR an.: -6.1	GR an.: -4.2	GR an.: -5.8	GR an.: -7.4	GR an.: -8.1	GR an.: -7.7	GR an.: -7.4	GR an.: -7.5	GR an.: -7.0
LXR $\alpha$	LXR $\alpha$ : -8.7	LXR $\alpha$ : -4.5	LXR $\alpha$ : -7.1	LXR $\alpha$ : -5.1	LXR $\alpha$ : -7.2	LXR $\alpha$ : -8.6	LXR $\alpha$ : -8.2	LXR $\alpha$ : -8.1	LXR $\alpha$ : -7.8	LXR $\alpha$ : -7.8	LXR $\alpha$ : -6.9
LXR $\beta$	LXR $\beta$ : -7.8	LXR $\beta$ : -9.2	LXR $\beta$ : -7.6	LXR $\beta$ : -5.1	LXR $\beta$ : -7.1	LXR $\beta$ : -9.2	LXR $\beta$ : -9.2	LXR $\beta$ : -9.3	LXR $\beta$ : -8.4	LXR $\beta$ : -8.6	LXR $\beta$ : -8.5
PPAR $\alpha$	PPAR $\alpha$ : -7.8	PPAR $\alpha$ : -1.3	PPAR $\alpha$ : -6.4	PPAR $\alpha$ : -4.7	PPAR $\alpha$ : -6.3	PPAR $\alpha$ : -7.7	PPAR $\alpha$ : -7.2	PPAR $\alpha$ : -7.6	PPAR $\alpha$ : -7.1	PPAR $\alpha$ : -7.2	PPAR $\alpha$ : -6.6
PPAR $\beta$	PPAR $\beta$ : -7.9	PPAR $\beta$ : -4.9	PPAR $\beta$ : -6.4	PPAR $\beta$ : -4.7	PPAR $\beta$ : -7.1	PPAR $\beta$ : -7.6	PPAR $\beta$ : -7.6	PPAR $\beta$ : -8.2	PPAR $\beta$ : -8.0	PPAR $\beta$ : -7.6	PPAR $\beta$ : -6.6
PPAR $\gamma$	PPAR $\gamma$ : -7.2	PPAR $\gamma$ : -6.3	PPAR $\gamma$ : -6.7	PPAR $\gamma$ : -4.8	PPAR $\gamma$ : -7.0	PPAR $\gamma$ : -6.4	PPAR $\gamma$ : -8.3	PPAR $\gamma$ : -7.8	PPAR $\gamma$ : -6.9	PPAR $\gamma$ : -6.6	PPAR $\gamma$ : -6.7
RXR $\alpha$	RXR $\alpha$ : -7.8	RXR $\alpha$ : -3.0	RXR $\alpha$ : -7.2	RXR $\alpha$ : -5.5	RXR $\alpha$ : -7.4	RXR $\alpha$ : -7.9	RXR $\alpha$ : -8.2	RXR $\alpha$ : -8.2	RXR $\alpha$ : -7.8	RXR $\alpha$ : -6.7	RXR $\alpha$ : -8.2
TR $\alpha$	TR $\alpha$ : -7.8	TR $\alpha$ : 3.6	TR $\alpha$ : -7.2	TR $\alpha$ : -5.3	TR $\alpha$ : -7.9	TR $\alpha$ : -4.8	TR $\alpha$ : -7.9	TR $\alpha$ : -7.3	TR $\alpha$ : -7.3	TR $\alpha$ : -4.6	TR $\alpha$ : -5.8
TR $\beta$	TR $\beta$ : -7.8	TR $\beta$ : -1.5	TR $\beta$ : -7.5	TR $\beta$ : -5.0	TR $\beta$ : -8.0	TR $\beta$ : -7.3	TR $\beta$ : -9.3	TR $\beta$ : -9.0	TR $\beta$ : -7.1	TR $\beta$ : -6.9	TR $\beta$ : -7.8

Spojina	Cefotaksim	Cefpodoksi m	Cefprozil	Ceftazidim	Ceftibuten	Ceftriakson	Cefuroksim	Celiprololije v klorid	Cetilpiridini jev klorid	Cetirizin	Cidofovir
AR	AR : -2.8	AR : -2.7	AR : -3.7	AR : 3.9	AR : -3.6	AR : 4.4	AR : -5.3	AR : -4.7	AR : -6.4	AR : -4.0	AR : -6.2
AR an.	AR an.: -4.8	AR an.: -3.9	AR an.: -5.0	AR an.: 1.7	AR an.: -3.4	AR an.: -1.5	AR an.: -5.8	AR an.: -5.6	AR an.: -6.6	AR an.: -5.3	AR an.: -6.6
ER $\alpha$	ER $\alpha$ : -5.7	ER $\alpha$ : -6.1	ER $\alpha$ : -9.0	ER $\alpha$ : -4.6	ER $\alpha$ : -5.6	ER $\alpha$ : -6.2	ER $\alpha$ : -6.1	ER $\alpha$ : -7.0	ER $\alpha$ : -6.9	ER $\alpha$ : -8.1	ER $\alpha$ : -6.2
ER $\alpha$ an.	ER $\alpha$ an.: -6.1	ER $\alpha$ an.: -5.6	ER $\alpha$ an.: -6.3	ER $\alpha$ an.: -7.0	ER $\alpha$ an.: -6.5	ER $\alpha$ an.: -6.6	ER $\alpha$ an.: -6.0	ER $\alpha$ an.: -6.7	ER $\alpha$ an.: -6.8	ER $\alpha$ an.: -8.2	ER $\alpha$ an.: -6.1
ER $\beta$	ER $\beta$ : -4.8	ER $\beta$ : -5.4	ER $\beta$ : -6.8	ER $\beta$ : 1.3	ER $\beta$ : -6.4	ER $\beta$ : 0.7	ER $\beta$ : -5.5	ER $\beta$ : -5.1	ER $\beta$ : -7.0	ER $\beta$ : -6.4	ER $\beta$ : -6.6
ER $\beta$ an.	ER $\beta$ an.: -5.8	ER $\beta$ an.: -6.4	ER $\beta$ an.: -6.8	ER $\beta$ an.: -7.0	ER $\beta$ an.: -7.0	ER $\beta$ an.: -6.5	ER $\beta$ an.: -6.3	ER $\beta$ an.: -6.2	ER $\beta$ an.: -6.7	ER $\beta$ an.: -7.6	ER $\beta$ an.: -6.1
GR	GR: -7.2	GR: -7.6	GR: -8.5	GR: -7.4	GR: -7.3	GR: -8.2	GR: -8.1	GR: -7.8	GR: -6.3	GR: -7.3	GR: -6.3
GR an.	GR an.: -7.3	GR an.: -6.8	GR an.: -8.1	GR an.: -8.5	GR an.: -8.1	GR an.: -8.2	GR an.: -7.4	GR an.: -7.1	GR an.: -5.9	GR an.: -7.8	GR an.: -5.8
LXR $\alpha$	LXR $\alpha$ : -7.0	LXR $\alpha$ : -7.1	LXR $\alpha$ : -9.0	LXR $\alpha$ : -6.5	LXR $\alpha$ : -7.7	LXR $\alpha$ : -8.0	LXR $\alpha$ : -7.5	LXR $\alpha$ : -8.2	LXR $\alpha$ : -7.3	LXR $\alpha$ : -8.4	LXR $\alpha$ : -6.2
LXR $\beta$	LXR $\beta$ : -8.4	LXR $\beta$ : -7.2	LXR $\beta$ : -9.7	LXR $\beta$ : -8.4	LXR $\beta$ : -8.5	LXR $\beta$ : -8.4	LXR $\beta$ : -8.7	LXR $\beta$ : -8.2	LXR $\beta$ : -7.2	LXR $\beta$ : -8.6	LXR $\beta$ : -6.2
PPAR $\alpha$	PPAR $\alpha$ : -6.5	PPAR $\alpha$ : -6.8	PPAR $\alpha$ : -8.2	PPAR $\alpha$ : -5.9	PPAR $\alpha$ : -7.8	PPAR $\alpha$ : -7.5	PPAR $\alpha$ : -6.8	PPAR $\alpha$ : -7.6	PPAR $\alpha$ : -5.5	PPAR $\alpha$ : -6.5	PPAR $\alpha$ : -6.4
PPAR $\beta$	PPAR $\beta$ : -6.9	PPAR $\beta$ : -7.4	PPAR $\beta$ : -8.0	PPAR $\beta$ : -7.6	PPAR $\beta$ : -7.6	PPAR $\beta$ : -8.3	PPAR $\beta$ : -7.5	PPAR $\beta$ : -7.8	PPAR $\beta$ : -7.4	PPAR $\beta$ : -7.1	PPAR $\beta$ : -6.6
PPAR $\gamma$	PPAR $\gamma$ : -6.7	PPAR $\gamma$ : -6.7	PPAR $\gamma$ : -8.2	PPAR $\gamma$ : -8.3	PPAR $\gamma$ : -7.8	PPAR $\gamma$ : -7.1	PPAR $\gamma$ : -7.2	PPAR $\gamma$ : -7.2	PPAR $\gamma$ : -6.6	PPAR $\gamma$ : -8.1	PPAR $\gamma$ : -5.7
RXR $\alpha$	RXR $\alpha$ : -7.4	RXR $\alpha$ : -6.5	RXR $\alpha$ : -7.8	RXR $\alpha$ : -4.1	RXR $\alpha$ : -8.9	RXR $\alpha$ : -7.2	RXR $\alpha$ : -7.1	RXR $\alpha$ : -8.0	RXR $\alpha$ : -7.3	RXR $\alpha$ : -7.4	RXR $\alpha$ : -6.4
TR $\alpha$	TR $\alpha$ : -7.2	TR $\alpha$ : -4.1	TR $\alpha$ : -7.3	TR $\alpha$ : 2.5	TR $\alpha$ : -4.8	TR $\alpha$ : -2.0	TR $\alpha$ : -7.2	TR $\alpha$ : -8.4	TR $\alpha$ : -7.6	TR $\alpha$ : -6.8	TR $\alpha$ : -6.3
TR $\beta$	TR $\beta$ : -7.6	TR $\beta$ : -4.8	TR $\beta$ : -9.0	TR $\beta$ : -2.8	TR $\beta$ : -5.4	TR $\beta$ : -5.3	TR $\beta$ : -8.2	TR $\beta$ : -8.5	TR $\beta$ : -7.5	TR $\beta$ : -7.8	TR $\beta$ : -6.0

Spojina	Ciklofosamid	Ciklopiroks	Cilastatin	Cilazapril	Cinarizin	Cineol	Cinhokain	Ciprofloksacin	Cistein D	Citarabin	Citalopram
AR	AR : -5.8	AR : -7.8	AR : -6.7	AR : -4.2	AR : -2.5	AR : -6.0	AR : -8.5	AR : -6.6	AR : -3.8	AR : -7.1	AR : -5.8
AR an.	AR an.: -5.9	AR an.: -8.0	AR an.: -6.8	AR an.: -6.3	AR an.: -5.8	AR an.: -6.1	AR an.: -8.3	AR an.: -7.3	AR an.: -3.7	AR an.: -7.2	AR an.: -7.3
ER $\alpha$	ER $\alpha$ : -5.5	ER $\alpha$ : -7.7	ER $\alpha$ : -6.8	ER $\alpha$ : -8.4	ER $\alpha$ : -9.0	ER $\alpha$ : -5.7	ER $\alpha$ : -8.2	ER $\alpha$ : -6.9	ER $\alpha$ : -3.5	ER $\alpha$ : -6.4	ER $\alpha$ : -8.9
ER $\alpha$ an.	ER $\alpha$ an.: -5.7	ER $\alpha$ an.: -7.2	ER $\alpha$ an.: -6.3	ER $\alpha$ an.: -7.7	ER $\alpha$ an.: -8.7	ER $\alpha$ an.: -5.9	ER $\alpha$ an.: -8.6	ER $\alpha$ an.: -6.6	ER $\alpha$ an.: -3.5	ER $\alpha$ an.: -6.4	ER $\alpha$ an.: -8.8
ER $\beta$	ER $\beta$ : -5.8	ER $\beta$ : -7.7	ER $\beta$ : -6.4	ER $\beta$ : -5.7	ER $\beta$ : -5.7	ER $\beta$ : -6.0	ER $\beta$ : -8.0	ER $\beta$ : -5.5	ER $\beta$ : -3.4	ER $\beta$ : -6.7	ER $\beta$ : -7.9
ER $\beta$ an.	ER $\beta$ an.: -5.7	ER $\beta$ an.: -7.4	ER $\beta$ an.: -5.9	ER $\beta$ an.: -7.6	ER $\beta$ an.: -9.0	ER $\beta$ an.: -5.9	ER $\beta$ an.: -8.9	ER $\beta$ an.: -6.1	ER $\beta$ an.: -3.3	ER $\beta$ an.: -6.6	ER $\beta$ an.: -8.3
GR	GR: -5.4	GR: -7.0	GR: -7.0	GR: -9.0	GR: -9.4	GR: -5.6	GR: -7.7	GR: -8.7	GR: -3.7	GR: -6.5	GR: -8.7
GR an.	GR an.: -5.1	GR an.: -6.6	GR an.: -6.6	GR an.: -7.8	GR an.: -9.1	GR an.: -5.6	GR an.: -7.6	GR an.: -7.3	GR an.: -3.5	GR an.: -6.0	GR an.: -7.4
LXR $\alpha$	LXR $\alpha$ : -6.2	LXR $\alpha$ : -8.0	LXR $\alpha$ : -7.6	LXR $\alpha$ : -9.0	LXR $\alpha$ : -10.2	LXR $\alpha$ : -6.3	LXR $\alpha$ : -8.7	LXR $\alpha$ : -8.9	LXR $\alpha$ : -3.5	LXR $\alpha$ : -6.5	LXR $\alpha$ : -9.1

LXR β	LXR β: -6.3	LXR β: -8.0	LXR β: -7.5	LXR β: -9.7	LXR β: -11.0	LXR β: -6.6	LXR β: -9.0	LXR β: -8.7	LXR β: -3.5	LXR β: -7.0	LXR β: -8.8
PPAR α	PPAR α: -5.2	PPAR α: -6.8	PPAR α: -6.7	PPAR α: -7.8	PPAR α: -9.2	PPAR α: -5.7	PPAR α: -7.9	PPAR α: -7.8	PPAR α: -3.5	PPAR α: -6.5	PPAR α: -7.2
PPAR β	PPAR β: -4.9	PPAR β: -7.2	PPAR β: -6.6	PPAR β: -7.4	PPAR β: -9.6	PPAR β: -6.1	PPAR β: -8.1	PPAR β: -8.0	PPAR β: -3.6	PPAR β: -6.9	PPAR β: -8.0
PPAR γ	PPAR γ: -4.1	PPAR γ: -7.8	PPAR γ: -6.6	PPAR γ: -7.5	PPAR γ: -9.7	PPAR γ: -4.9	PPAR γ: -7.8	PPAR γ: -7.9	PPAR γ: -3.3	PPAR γ: -6.4	PPAR γ: -7.3
RXR α	RXR α: -5.5	RXR α: -7.5	RXR α: -7.8	RXR α: -8.6	RXR α: -10.5	RXR α: -6.3	RXR α: -8.7	RXR α: -8.3	RXR α: -4.0	RXR α: -6.0	RXR α: -8.3
TR α	TR α: -4.7	TR α: -7.5	TR α: -8.1	TR α: -5.9	TR α: -9.0	TR α: -6.2	TR α: -8.7	TR α: -8.5	TR α: -3.8	TR α: -6.3	TR α: -7.6
TR β	TR β: -5.7	TR β: -7.7	TR β: -7.9	TR β: -6.9	TR β: -9.2	TR β: -6.3	TR β: -8.8	TR β: -8.8	TR β: -3.6	TR β: -6.2	TR β: -8.9

Spojina	Citronska kislina	Dabigatran eteksilat	Dapoksetin	Dasabuvir	Dasatinib	Decitabin	Deferipron	Deksametaz onfosfat	Deksketopr ofen	Dekslansopr azol	Deksrazoks an
AR	AR : -5.6	AR : 1.4	AR : -7.3	AR : 12.7	AR : 3.2	AR : -6.7	AR : -5.6	AR : -2.5	AR : -8.6	AR : -5.7	AR : -7.8
AR an.	AR an.: -5.1	AR an.: 0.7	AR an.: -7.7	AR an.: 14.1	AR an.: -0.7	AR an.: -6.8	AR an.: -5.4	AR an.: -4.8	AR an.: -8.4	AR an.: -7.4	AR an.: -7.1
ER α	ER α: -4.8	ER α: -7.0	ER α: -8.4	ER α: -7.0	ER α: -8.0	ER α: -6.6	ER α: -5.4	ER α: -6.9	ER α: -8.7	ER α: -8.4	ER α: -7.5
ER α an.	ER α an.: -4.7	ER α an.: -8.1	ER α an.: -8.4	ER α an.: -8.3	ER α an.: -9.2	ER α an.: -6.8	ER α an.: -5.1	ER α an.: -7.4	ER α an.: -8.2	ER α an.: -8.3	ER α an.: -7.4
ER β	ER β: -5.0	ER β: 8.3	ER β: -7.5	ER β: 12.1	ER β: -1.6	ER β: -6.9	ER β: -5.2	ER β: -1.8	ER β: -8.2	ER β: -8.5	ER β: -7.7
ER β an.	ER β an.: -4.6	ER β an.: -7.4	ER β an.: -6.8	ER β an.: -8.2	ER β an.: -8.2	ER β an.: -6.4	ER β an.: -5.2	ER β an.: -5.5	ER β an.: -8.3	ER β an.: -7.3	ER β an.: -6.6
GR	GR: -5.1	GR: -8.2	GR: -7.9	GR: -9.2	GR: -7.7	GR: -6.3	GR: -5.2	GR: -7.7	GR: -8.5	GR: -9.5	GR: -7.5
GR an.	GR an.: -4.7	GR an.: -7.9	GR an.: -8.4	GR an.: -9.7	GR an.: -9.3	GR an.: -5.8	GR an.: -4.8	GR an.: -8.5	GR an.: -8.1	GR an.: -7.9	GR an.: -6.6
LXR α	LXR α: -4.9	LXR α: -8.2	LXR α: -10.2	LXR α: -6.6	LXR α: -9.3	LXR α: -6.5	LXR α: -5.3	LXR α: -8.3	LXR α: -9.4	LXR α: -9.7	LXR α: -7.8
LXR β	LXR β: -5.2	LXR β: -7.0	LXR β: -9.8	LXR β: -8.3	LXR β: -9.9	LXR β: -7.0	LXR β: -5.5	LXR β: -11.2	LXR β: -9.3	LXR β: -9.6	LXR β: -7.9
PPAR α	PPAR α: -4.7	PPAR α: -8.0	PPAR α: -8.1	PPAR α: -7.6	PPAR α: -8.2	PPAR α: -6.5	PPAR α: -5.4	PPAR α: -6.0	PPAR α: -8.5	PPAR α: -8.7	PPAR α: -7.4
PPAR β	PPAR β: -5.2	PPAR β: -8.4	PPAR β: -8.8	PPAR β: -8.8	PPAR β: -9.3	PPAR β: -6.6	PPAR β: -5.3	PPAR β: -6.8	PPAR β: -8.6	PPAR β: -9.2	PPAR β: -7.2
PPAR γ	PPAR γ: -5.2	PPAR γ: -9.2	PPAR γ: -8.5	PPAR γ: -8.4	PPAR γ: -8.3	PPAR γ: -5.9	PPAR γ: -4.9	PPAR γ: -6.9	PPAR γ: -7.9	PPAR γ: -8.6	PPAR γ: -7.4
RXR α	RXR α: -5.3	RXR α: -6.8	RXR α: -9.3	RXR α: -3.5	RXR α: -8.2	RXR α: -6.2	RXR α: -5.1	RXR α: -7.1	RXR α: -9.2	RXR α: -9.5	RXR α: -7.6
TR α	TR α: -5.1	TR α: 1.9	TR α: -8.4	TR α: 13.0	TR α: -3.9	TR α: -6.4	TR α: -5.3	TR α: -2.4	TR α: -9.1	TR α: -9.6	TR α: -7.6
TR β	TR β: -5.1	TR β: -0.9	TR β: -8.3	TR β: 6.5	TR β: -6.1	TR β: -6.7	TR β: -5.1	TR β: -5.3	TR β: -9.2	TR β: -9.7	TR β: -7.8

Spojina	Dekstran	Dekstromet orfan	Desloratadi n	Didanozin	Dienogest	Dihidroergo kristin	Dinatrijev pamidronat	Deksmedeto midin	Dekspanten ol	Diklofenak	Diltiazem
AR	AR : -1.6	AR : -6.3	AR : -0.8	AR : -7.8	AR : -8.1	AR : 38.4	AR : -4.8	AR : -7.4	AR : -5.8	AR : -7.1	AR : -3.5
AR an.	AR an.: -4.1	AR an.: -6.9	AR an.: -6.9	AR an.: -7.4	AR an.: -8.3	AR an.: 29.8	AR an.: -5.3	AR an.: -7.7	AR an.: -5.8	AR an.: -7.7	AR an.: -5.8
ER α	ER α: -6.3	ER α: -7.9	ER α: -9.3	ER α: -7.3	ER α: -9.2	ER α: -5.2	ER α: -4.8	ER α: -7.9	ER α: -5.3	ER α: -7.9	ER α: -6.9
ER α an.	ER α an.: -5.6	ER α an.: -8.9	ER α an.: -8.1	ER α an.: -7.1	ER α an.: -6.6	ER α an.: -8.2	ER α an.: -4.6	ER α an.: -7.3	ER α an.: -5.4	ER α an.: -8.3	ER α an.: -6.3
ER β	ER β: -3.1	ER β: -6.5	ER β: -6.7	ER β: -7.1	ER β: -8.8	ER β: 26.9	ER β: -4.8	ER β: -7.8	ER β: -5.4	ER β: -8.2	ER β: -4.8
ER β an.	ER β an.: -7.0	ER β an.: -6.7	ER β an.: -8.5	ER β an.: -7.2	ER β an.: -7.5	ER β an.: -7.0	ER β an.: -4.5	ER β an.: -7.7	ER β an.: -5.1	ER β an.: -7.8	ER β an.: -5.7
GR	GR: -8.5	GR: -7.3	GR: -7.4	GR: -6.9	GR: -9.4	GR: 10.0	GR: -5.0	GR: -7.3	GR: -5.5	GR: -7.5	GR: -7.1
GR an.	GR an.: -7.3	GR an.: -8.2	GR an.: -8.4	GR an.: -5.9	GR an.: -8.1	GR an.: -7.8	GR an.: -4.7	GR an.: -7.0	GR an.: -5.0	GR an.: -7.4	GR an.: -7.0
LXR α	LXR α: -8.3	LXR α: -8.7	LXR α: -9.5	LXR α: -7.7	LXR α: -10.0	LXR α: -4.6	LXR α: -5.1	LXR α: -8.0	LXR α: -5.8	LXR α: -8.5	LXR α: -7.0
LXR β	LXR β: -8.4	LXR β: -8.8	LXR β: -8.0	LXR β: -7.4	LXR β: -10.2	LXR β: -3.0	LXR β: -5.4	LXR β: -8.9	LXR β: -5.7	LXR β: -8.1	LXR β: -8.8
PPAR α	PPAR α: -8.4	PPAR α: -8.0	PPAR α: -9.2	PPAR α: -7.2	PPAR α: -7.2	PPAR α: -0.7	PPAR α: -5.3	PPAR α: -6.9	PPAR α: -5.6	PPAR α: -7.6	PPAR α: -7.7
PPAR β	PPAR β: -7.6	PPAR β: -7.4	PPAR β: -8.2	PPAR β: -6.8	PPAR β: -7.9	PPAR β: -5.2	PPAR β: -5.7	PPAR β: -6.9	PPAR β: -5.9	PPAR β: -7.3	PPAR β: -5.8
PPAR γ	PPAR γ: -7.8	PPAR γ: -6.5	PPAR γ: -8.4	PPAR γ: -6.8	PPAR γ: -7.2	PPAR γ: -8.6	PPAR γ: -4.8	PPAR γ: -6.4	PPAR γ: -5.1	PPAR γ: -7.4	PPAR γ: -7.2
RXR α	RXR α: -7.3	RXR α: -7.8	RXR α: -9.7	RXR α: -7.9	RXR α: -8.7	RXR α: 7.6	RXR α: -4.3	RXR α: -7.1	RXR α: -5.7	RXR α: -8.0	RXR α: -8.2
TR α	TR α: -6.0	TR α: -4.8	TR α: -7.3	TR α: -6.4	TR α: -7.3	TR α: 35.5	TR α: -4.3	TR α: -8.1	TR α: -5.7	TR α: -8.5	TR α: -1.1
TR β	TR β: -5.7	TR β: -8.9	TR β: -6.5	TR β: -7.1	TR β: -8.7	TR β: 23.0	TR β: -4.8	TR β: -7.7	TR β: -5.9	TR β: -8.4	TR β: -6.3

Spojina	Dimetilfumarat	Diosmin	Dipiridamol	Dizoproksilt enofovir	Dobutamin	Dokozaol	Doksazosin	Doksiciklin	Doksilamin	Doksrubicin	Dolutegravir
AR	AR : -4.9	AR : 10.0	AR : 9.6	AR : -4.3	AR : -7.2	AR : -6.0	AR : 6.5	AR : -3.5	AR : -6.8	AR : 7.0	AR : -5.7
AR an.	AR an.: -4.6	AR an.: 7.0	AR an.: 1.8	AR an.: -4.4	AR an.: -7.4	AR an.: -6.0	AR an.: 9.4	AR an.: -5.3	AR an.: -7.7	AR an.: 4.6	AR an.: -5.8
ER $\alpha$	ER $\alpha$ : -4.3	ER $\alpha$ : -7.1	ER $\alpha$ : -3.5	ER $\alpha$ : -6.9	ER $\alpha$ : -8.4	ER $\alpha$ : -6.6	ER $\alpha$ : -6.2	ER $\alpha$ : -5.0	ER $\alpha$ : -8.0	ER $\alpha$ : -4.8	ER $\alpha$ : -6.8
ER $\alpha$ an.	ER $\alpha$ an.: -4.0	ER $\alpha$ an.: -8.4	ER $\alpha$ an.: -5.2	ER $\alpha$ an.: -7.0	ER $\alpha$ an.: -8.0	ER $\alpha$ an.: -6.4	ER $\alpha$ an.: -8.6	ER $\alpha$ an.: -8.2	ER $\alpha$ an.: -7.7	ER $\alpha$ an.: -7.7	ER $\alpha$ an.: -7.8
ER $\beta$	ER $\beta$ : -4.4	ER $\beta$ : 4.5	ER $\beta$ : 3.0	ER $\beta$ : -5.0	ER $\beta$ : -8.3	ER $\beta$ : -6.2	ER $\beta$ : 6.1	ER $\beta$ : -5.3	ER $\beta$ : -7.9	ER $\beta$ : 8.7	ER $\beta$ : -5.3
ER $\beta$ an.	ER $\beta$ an.: -4.1	ER $\beta$ an.: -6.7	ER $\beta$ an.: -4.9	ER $\beta$ an.: -6.5	ER $\beta$ an.: -7.7	ER $\beta$ an.: -6.0	ER $\beta$ an.: -7.9	ER $\beta$ an.: -6.6	ER $\beta$ an.: -7.7	ER $\beta$ an.: -8.4	ER $\beta$ an.: -8.2
GR	GR: -4.8	GR: -9.6	GR: -2.6	GR: -7.7	GR: -7.5	GR: -5.9	GR: -8.1	GR: -7.6	GR: -7.4	GR: -3.8	GR: -10.0
GR an.	GR an.: -4.1	GR an.: -9.5	GR an.: -6.1	GR an.: -6.8	GR an.: -7.1	GR an.: -5.4	GR an.: -9.6	GR an.: -8.1	GR an.: -7.0	GR an.: -8.4	GR an.: -9.6
LXR $\alpha$	LXR $\alpha$ : -4.5	LXR $\alpha$ : -10.2	LXR $\alpha$ : -3.6	LXR $\alpha$ : -8.2	LXR $\alpha$ : -8.8	LXR $\alpha$ : -7.0	LXR $\alpha$ : -10.9	LXR $\alpha$ : -1.9	LXR $\alpha$ : -8.2	LXR $\alpha$ : -7.5	LXR $\alpha$ : -11.1
LXR $\beta$	LXR $\beta$ : -4.5	LXR $\beta$ : -7.5	LXR $\beta$ : -1.7	LXR $\beta$ : -7.9	LXR $\beta$ : -8.1	LXR $\beta$ : -7.0	LXR $\beta$ : -10.6	LXR $\beta$ : -6.6	LXR $\beta$ : -7.9	LXR $\beta$ : -10.6	LXR $\beta$ : -11.5
PPAR $\alpha$	PPAR $\alpha$ : -4.3	PPAR $\alpha$ : -9.7	PPAR $\alpha$ : -5.0	PPAR $\alpha$ : -7.7	PPAR $\alpha$ : -8.1	PPAR $\alpha$ : -5.8	PPAR $\alpha$ : -9.0	PPAR $\alpha$ : -3.0	PPAR $\alpha$ : -7.2	PPAR $\alpha$ : -8.5	PPAR $\alpha$ : -8.4
PPAR $\beta$	PPAR $\beta$ : -4.5	PPAR $\beta$ : -8.9	PPAR $\beta$ : -4.2	PPAR $\beta$ : -7.6	PPAR $\beta$ : -8.1	PPAR $\beta$ : -6.4	PPAR $\beta$ : -9.1	PPAR $\beta$ : -5.8	PPAR $\beta$ : -6.8	PPAR $\beta$ : -8.6	PPAR $\beta$ : -9.9
PPAR $\gamma$	PPAR $\gamma$ : -4.7	PPAR $\gamma$ : -10.1	PPAR $\gamma$ : -6.8	PPAR $\gamma$ : -7.9	PPAR $\gamma$ : -7.7	PPAR $\gamma$ : -6.2	PPAR $\gamma$ : -8.6	PPAR $\gamma$ : -5.1	PPAR $\gamma$ : -7.5	PPAR $\gamma$ : -8.6	PPAR $\gamma$ : -8.7
RXR $\alpha$	RXR $\alpha$ : -4.9	RXR $\alpha$ : -7.2	RXR $\alpha$ : -3.1	RXR $\alpha$ : -7.6	RXR $\alpha$ : -8.7	RXR $\alpha$ : -7.1	RXR $\alpha$ : -4.2	RXR $\alpha$ : -3.0	RXR $\alpha$ : -7.6	RXR $\alpha$ : -5.7	RXR $\alpha$ : -11.0
TR $\alpha$	TR $\alpha$ : -4.6	TR $\alpha$ : -0.0	TR $\alpha$ : 10.2	TR $\alpha$ : -5.8	TR $\alpha$ : -9.3	TR $\alpha$ : -7.1	TR $\alpha$ : -1.7	TR $\alpha$ : 4.4	TR $\alpha$ : -7.7	TR $\alpha$ : 9.3	TR $\alpha$ : -7.2
TR $\beta$	TR $\beta$ : -4.6	TR $\beta$ : 1.3	TR $\beta$ : 7.0	TR $\beta$ : -7.1	TR $\beta$ : -9.3	TR $\beta$ : -6.9	TR $\beta$ : -2.8	TR $\beta$ : -1.1	TR $\beta$ : -7.9	TR $\beta$ : 1.4	TR $\beta$ : -8.0

Spojina	Donepezil	Dopaminije v klorid	Doripenem	Dorzolamid	Dronedaron	Droperidol	Duloksetin	Dutasterid	Efavirenz	Efedrin	Eksemestan
AR	AR : -3.8	AR : -6.0	AR : -5.1	AR : -5.7	AR : -1.9	AR : -6.5	AR : -7.7	AR : 16.7	AR : -3.9	AR : -6.6	AR : -8.0
AR an.	AR an.: -2.9	AR an.: -5.9	AR an.: -6.5	AR an.: -6.5	AR an.: -3.2	AR an.: -7.9	AR an.: -8.2	AR an.: 8.5	AR an.: -6.8	AR an.: -6.7	AR an.: -8.3
ER $\alpha$	ER $\alpha$ : -8.5	ER $\alpha$ : -5.5	ER $\alpha$ : -6.3	ER $\alpha$ : -6.7	ER $\alpha$ : -7.2	ER $\alpha$ : -8.9	ER $\alpha$ : -8.5	ER $\alpha$ : -4.5	ER $\alpha$ : -8.0	ER $\alpha$ : -5.8	ER $\alpha$ : -8.1
ER $\alpha$ an.	ER $\alpha$ an.: -8.5	ER $\alpha$ an.: -5.7	ER $\alpha$ an.: -7.1	ER $\alpha$ an.: -7.2	ER $\alpha$ an.: -7.9	ER $\alpha$ an.: -9.4	ER $\alpha$ an.: -8.7	ER $\alpha$ an.: -8.3	ER $\alpha$ an.: -8.4	ER $\alpha$ an.: -5.8	ER $\alpha$ an.: -8.5
ER $\beta$	ER $\beta$ : -3.6	ER $\beta$ : -5.6	ER $\beta$ : -5.4	ER $\beta$ : -6.9	ER $\beta$ : -2.9	ER $\beta$ : -8.5	ER $\beta$ : -8.0	ER $\beta$ : 8.2	ER $\beta$ : -8.4	ER $\beta$ : -5.8	ER $\beta$ : -7.7
ER $\beta$ an.	ER $\beta$ an.: -8.0	ER $\beta$ an.: -5.6	ER $\beta$ an.: -5.6	ER $\beta$ an.: -6.4	ER $\beta$ an.: -7.5	ER $\beta$ an.: -8.7	ER $\beta$ an.: -8.2	ER $\beta$ an.: -7.3	ER $\beta$ an.: -7.6	ER $\beta$ an.: -5.9	ER $\beta$ an.: -7.6
GR	GR: -9.1	GR: -6.3	GR: -8.5	GR: -7.1	GR: -8.0	GR: -10.3	GR: -8.2	GR: -3.3	GR: -8.5	GR: -5.9	GR: -9.7
GR an.	GR an.: -8.5	GR an.: -5.7	GR an.: -6.9	GR an.: -6.6	GR an.: -7.9	GR an.: -8.7	GR an.: -7.5	GR an.: -8.9	GR an.: -8.1	GR an.: -5.6	GR an.: -8.4
LXR $\alpha$	LXR $\alpha$ : -10.7	LXR $\alpha$ : -6.1	LXR $\alpha$ : -8.7	LXR $\alpha$ : -7.2	LXR $\alpha$ : -8.8	LXR $\alpha$ : -10.6	LXR $\alpha$ : -8.9	LXR $\alpha$ : -4.6	LXR $\alpha$ : -8.9	LXR $\alpha$ : -6.4	LXR $\alpha$ : -10.3
LXR $\beta$	LXR $\beta$ : -10.8	LXR $\beta$ : -6.1	LXR $\beta$ : -8.9	LXR $\beta$ : -7.7	LXR $\beta$ : -9.1	LXR $\beta$ : -11.1	LXR $\beta$ : -8.7	LXR $\beta$ : -6.5	LXR $\beta$ : -8.6	LXR $\beta$ : -6.4	LXR $\beta$ : -10.7
PPAR $\alpha$	PPAR $\alpha$ : -7.4	PPAR $\alpha$ : -5.6	PPAR $\alpha$ : -7.6	PPAR $\alpha$ : -7.2	PPAR $\alpha$ : -8.7	PPAR $\alpha$ : -9.8	PPAR $\alpha$ : -8.3	PPAR $\alpha$ : -4.1	PPAR $\alpha$ : -8.2	PPAR $\alpha$ : -5.8	PPAR $\alpha$ : -8.8
PPAR $\beta$	PPAR $\beta$ : -9.2	PPAR $\beta$ : -6.2	PPAR $\beta$ : -7.9	PPAR $\beta$ : -6.8	PPAR $\beta$ : -8.9	PPAR $\beta$ : -10.4	PPAR $\beta$ : -7.8	PPAR $\beta$ : -7.3	PPAR $\beta$ : -7.9	PPAR $\beta$ : -6.2	PPAR $\beta$ : -8.6
PPAR $\gamma$	PPAR $\gamma$ : -8.5	PPAR $\gamma$ : -5.4	PPAR $\gamma$ : -6.8	PPAR $\gamma$ : -6.6	PPAR $\gamma$ : -9.4	PPAR $\gamma$ : -9.9	PPAR $\gamma$ : -7.3	PPAR $\gamma$ : -8.3	PPAR $\gamma$ : -7.9	PPAR $\gamma$ : -6.1	PPAR $\gamma$ : -6.9
RXR $\alpha$	RXR $\alpha$ : -9.0	RXR $\alpha$ : -6.0	RXR $\alpha$ : -8.4	RXR $\alpha$ : -7.3	RXR $\alpha$ : -7.4	RXR $\alpha$ : -10.5	RXR $\alpha$ : -8.3	RXR $\alpha$ : -6.7	RXR $\alpha$ : -9.7	RXR $\alpha$ : -6.3	RXR $\alpha$ : -8.6
TR $\alpha$	TR $\alpha$ : -7.4	TR $\alpha$ : -5.9	TR $\alpha$ : -7.0	TR $\alpha$ : -5.4	TR $\alpha$ : -2.2	TR $\alpha$ : -9.8	TR $\alpha$ : -8.1	TR $\alpha$ : 11.4	TR $\alpha$ : -5.0	TR $\alpha$ : -6.5	TR $\alpha$ : -5.4
TR $\beta$	TR $\beta$ : -10.0	TR $\beta$ : -6.0	TR $\beta$ : -8.2	TR $\beta$ : -5.6	TR $\beta$ : -4.0	TR $\beta$ : -9.5	TR $\beta$ : -8.5	TR $\beta$ : 3.5	TR $\beta$ : -6.9	TR $\beta$ : -6.5	TR $\beta$ : -9.1

Spojina	Eletriptan	Emedastin	Empagliflozin	Emtricitabin	Enalapril	Enalaprilat	Entakapon	Entekavir	Epirubicin	Eplerenon	Epoprostenol
AR	AR : -6.2	AR : -6.9	AR : -0.7	AR : -6.8	AR : -6.0	AR : -7.4	AR : -6.4	AR : -8.4	AR : 8.6	AR : -2.7	AR : -6.6
AR an.	AR an.: -7.2	AR an.: -7.5	AR an.: -4.9	AR an.: -7.0	AR an.: -6.6	AR an.: -7.5	AR an.: -6.1	AR an.: -8.2	AR an.: 5.2	AR an.: -5.1	AR an.: -6.9
ER $\alpha$	ER $\alpha$ : -7.1	ER $\alpha$ : -7.3	ER $\alpha$ : -7.2	ER $\alpha$ : -6.7	ER $\alpha$ : -7.9	ER $\alpha$ : -8.6	ER $\alpha$ : -6.0	ER $\alpha$ : -7.7	ER $\alpha$ : -4.6	ER $\alpha$ : -6.9	ER $\alpha$ : -7.9
ER $\alpha$ an.	ER $\alpha$ an.: -9.2	ER $\alpha$ an.: -7.0	ER $\alpha$ an.: -8.4	ER $\alpha$ an.: -6.5	ER $\alpha$ an.: -8.1	ER $\alpha$ an.: -7.3	ER $\alpha$ an.: -6.5	ER $\alpha$ an.: -7.4	ER $\alpha$ an.: -7.4	ER $\alpha$ an.: -7.7	ER $\alpha$ an.: -7.7
ER $\beta$	ER $\beta$ : -7.6	ER $\beta$ : -6.9	ER $\beta$ : -4.9	ER $\beta$ : -6.7	ER $\beta$ : -7.1	ER $\beta$ : -7.8	ER $\beta$ : -5.8	ER $\beta$ : -7.9	ER $\beta$ : 10.0	ER $\beta$ : -2.9	ER $\beta$ : -7.3
ER $\beta$ an.	ER $\beta$ an.: -8.3	ER $\beta$ an.: -7.3	ER $\beta$ an.: -7.6	ER $\beta$ an.: -6.5	ER $\beta$ an.: -7.8	ER $\beta$ an.: -7.5	ER $\beta$ an.: -6.5	ER $\beta$ an.: -7.4	ER $\beta$ an.: -8.0	ER $\beta$ an.: -6.1	ER $\beta$ an.: -7.5
GR	GR: -8.2	GR: -7.7	GR: -9.5	GR: -6.6	GR: -8.5	GR: -8.9	GR: -7.5	GR: -7.2	GR: -5.7	GR: -8.4	GR: -7.0
GR an.	GR an.: -8.4	GR an.: -6.8	GR an.: -8.2	GR an.: -5.8	GR an.: -7.1	GR an.: -7.5	GR an.: -6.2	GR an.: -6.8	GR an.: -8.6	GR an.: -9.4	GR an.: -6.8
LXR $\alpha$	LXR $\alpha$ : -10.4	LXR $\alpha$ : -8.2	LXR $\alpha$ : -9.8	LXR $\alpha$ : -6.8	LXR $\alpha$ : -9.3	LXR $\alpha$ : -9.0	LXR $\alpha$ : -7.8	LXR $\alpha$ : -8.8	LXR $\alpha$ : -7.0	LXR $\alpha$ : -7.7	LXR $\alpha$ : -8.5

LXR β	LXR β: -10.1	LXR β: -8.0	LXR β: -10.3	LXR β: -6.7	LXR β: -9.2	LXR β: -9.1	LXR β: -7.9	LXR β: -7.8	LXR β: -7.6	LXR β: -9.9	LXR β: -8.5
PPAR α	PPAR α: -8.5	PPAR α: -7.4	PPAR α: -7.9	PPAR α: -6.4	PPAR α: -7.5	PPAR α: -7.3	PPAR α: -7.0	PPAR α: -7.6	PPAR α: -8.2	PPAR α: -3.3	PPAR α: -7.3
PPAR β	PPAR β: -9.9	PPAR β: -7.3	PPAR β: -8.7	PPAR β: -6.6	PPAR β: -8.3	PPAR β: -8.9	PPAR β: -6.7	PPAR β: -7.0	PPAR β: -7.3	PPAR β: -7.6	PPAR β: -6.9
PPAR γ	PPAR γ: -9.0	PPAR γ: -8.0	PPAR γ: -8.2	PPAR γ: -7.0	PPAR γ: -8.0	PPAR γ: -8.3	PPAR γ: -6.5	PPAR γ: -6.7	PPAR γ: -8.5	PPAR γ: -7.2	PPAR γ: -6.9
RXR α	RXR α: -9.9	RXR α: -7.0	RXR α: -8.9	RXR α: -6.1	RXR α: -8.7	RXR α: -9.2	RXR α: -8.3	RXR α: -8.2	RXR α: -5.4	RXR α: -6.3	RXR α: -8.2
TR α	TR α: -7.4	TR α: -6.9	TR α: -6.9	TR α: -6.4	TR α: -7.5	TR α: -8.7	TR α: -7.6	TR α: -7.5	TR α: 7.8	TR α: -1.5	TR α: -5.5
TR β	TR β: -9.5	TR β: -7.4	TR β: -7.1	TR β: -6.6	TR β: -8.2	TR β: -8.3	TR β: -8.2	TR β: -7.6	TR β: 1.7	TR β: -8.0	TR β: -7.2

Spojina	Eprazinon	Eposartan	Ergokalciferol	Eribulin	Erlotinib	Ertapenem	Escitalopram	Esmolol	Esomeprazol	Estradiolvalerat	Etodolak
AR	AR : -5.5	AR : -4.6	AR : -1.3	AR : 62.6	AR : -3.8	AR : -1.2	AR : -5.6	AR : -7.0	AR : -4.2	AR : -6.1	AR : -7.2
AR an.	AR an.: -6.9	AR an.: -3.8	AR an.: -3.2	AR an.: 47.7	AR an.: -5.6	AR an.: -4.5	AR an.: -7.4	AR an.: -7.2	AR an.: -6.5	AR an.: -5.2	AR an.: -8.3
ER α	ER α: -8.1	ER α: -7.3	ER α: -7.9	ER α: -3.6	ER α: -6.1	ER α: -7.5	ER α: -8.2	ER α: -6.9	ER α: -7.7	ER α: -7.9	ER α: -8.2
ER α an.	ER α an.: -8.1	ER α an.: -7.8	ER α an.: -8.5	ER α an.: -7.8	ER α an.: -6.9	ER α an.: -7.9	ER α an.: -8.4	ER α an.: -6.5	ER α an.: -7.7	ER α an.: -7.3	ER α an.: -8.1
ER β	ER β: -5.9	ER β: -3.6	ER β: -3.1	ER β: 46.8	ER β: -4.8	ER β: -3.6	ER β: -6.0	ER β: -7.2	ER β: -6.8	ER β: -8.1	ER β: -8.3
ER β an.	ER β an.: -7.8	ER β an.: -7.6	ER β an.: -8.1	ER β an.: -6.6	ER β an.: -6.6	ER β an.: -8.1	ER β an.: -8.2	ER β an.: -6.3	ER β an.: -6.8	ER β an.: -7.1	ER β an.: -7.6
GR	GR: -9.6	GR: -8.9	GR: -9.4	GR: 36.2	GR: -8.5	GR: -9.3	GR: -8.3	GR: -7.3	GR: -9.1	GR: -9.4	GR: -7.9
GR an.	GR an.: -8.0	GR an.: -7.3	GR an.: -9.1	GR an.: 1.3	GR an.: -7.1	GR an.: -8.6	GR an.: -7.5	GR an.: -5.9	GR an.: -8.1	GR an.: -8.5	GR an.: -7.8
LXR α	LXR α: -9.1	LXR α: -8.6	LXR α: -11.6	LXR α: -1.2	LXR α: -8.1	LXR α: -9.5	LXR α: -8.4	LXR α: -7.4	LXR α: -9.2	LXR α: -9.9	LXR α: -9.1
LXR β	LXR β: -9.6	LXR β: -9.2	LXR β: -11.0	LXR β: 29.8	LXR β: -8.5	LXR β: -9.8	LXR β: -8.8	LXR β: -7.4	LXR β: -9.0	LXR β: -10.6	LXR β: -9.5
PPAR α	PPAR α: -8.2	PPAR α: -7.7	PPAR α: -9.4	PPAR α: 17.0	PPAR α: -7.2	PPAR α: -7.5	PPAR α: -8.1	PPAR α: -7.0	PPAR α: -8.1	PPAR α: -5.6	PPAR α: -7.8
PPAR β	PPAR β: -8.9	PPAR β: -8.8	PPAR β: -8.2	PPAR β: 25.1	PPAR β: -7.6	PPAR β: -8.8	PPAR β: -7.8	PPAR β: -7.0	PPAR β: -8.5	PPAR β: -7.9	PPAR β: -7.7
PPAR γ	PPAR γ: -9.3	PPAR γ: -7.9	PPAR γ: -8.3	PPAR γ: -2.6	PPAR γ: -7.5	PPAR γ: -7.7	PPAR γ: -7.4	PPAR γ: -6.9	PPAR γ: -7.9	PPAR γ: -8.1	PPAR γ: -6.7
RXR α	RXR α: -9.6	RXR α: -9.3	RXR α: -8.6	RXR α: 24.5	RXR α: -8.6	RXR α: -9.7	RXR α: -8.4	RXR α: -7.8	RXR α: -8.6	RXR α: -8.6	RXR α: -8.6
TR α	TR α: -8.6	TR α: -5.4	TR α: -5.5	TR α: 63.3	TR α: -7.0	TR α: -4.0	TR α: -7.4	TR α: -7.8	TR α: -8.0	TR α: -5.9	TR α: -6.4
TR β	TR β: -9.7	TR β: -5.6	TR β: -7.8	TR β: 57.6	TR β: -8.2	TR β: -5.2	TR β: -8.4	TR β: -7.0	TR β: -8.7	TR β: -9.2	TR β: -8.3

Spojina	Etonogestrel	Etopozid	Etorikoksib	Etravirin	Famotidine	Fampridin	Febuksostat	Fenhon	Fenilalanin	Fenilefrin	Fenoksimetil penicilin
AR	AR : -8.6	AR : 17.7	AR : 2.6	AR : 2.4	AR : -6.5	AR : -4.2	AR : -6.8	AR : -6.3	AR : -6.8	AR : -6.4	AR : -6.8
AR an.	AR an.: -8.5	AR an.: 13.7	AR an.: -3.2	AR an.: -2.6	AR an.: -6.6	AR an.: -4.5	AR an.: -7.0	AR an.: -6.3	AR an.: -6.7	AR an.: -6.3	AR an.: -8.2
ER α	ER α: -8.2	ER α: -5.0	ER α: -8.6	ER α: -7.2	ER α: -5.9	ER α: -4.2	ER α: -5.5	ER α: -5.9	ER α: -5.8	ER α: -5.7	ER α: -7.3
ER α an.	ER α an.: -8.6	ER α an.: -6.9	ER α an.: -9.0	ER α an.: -7.8	ER α an.: -6.6	ER α an.: -4.4	ER α an.: -6.4	ER α an.: -6.0	ER α an.: -5.7	ER α an.: -5.9	ER α an.: -7.4
ER β	ER β: -6.6	ER β: 13.9	ER β: -3.9	ER β: -0.9	ER β: -5.8	ER β: -4.3	ER β: -5.1	ER β: -6.1	ER β: -6.0	ER β: -5.7	ER β: -6.5
ER β an.	ER β an.: -6.1	ER β an.: -6.4	ER β an.: -8.6	ER β an.: -6.8	ER β an.: -6.1	ER β an.: -4.4	ER β an.: -6.4	ER β an.: -6.2	ER β an.: -5.7	ER β an.: -5.9	ER β an.: -6.9
GR	GR: -8.4	GR: -6.3	GR: -6.8	GR: -9.1	GR: -6.4	GR: -4.4	GR: -8.3	GR: -5.3	GR: -6.5	GR: -6.0	GR: -9.0
GR an.	GR an.: -8.4	GR an.: -7.8	GR an.: -7.5	GR an.: -8.1	GR an.: -5.6	GR an.: -4.1	GR an.: -6.7	GR an.: -5.9	GR an.: -5.4	GR an.: -5.9	GR an.: -7.5
LXR α	LXR α: -9.8	LXR α: -4.9	LXR α: -8.4	LXR α: -9.7	LXR α: -6.3	LXR α: -4.0	LXR α: -8.2	LXR α: -6.6	LXR α: -6.4	LXR α: -6.2	LXR α: -8.9
LXR β	LXR β: -10.3	LXR β: -3.6	LXR β: -8.2	LXR β: -10.0	LXR β: -6.8	LXR β: -4.2	LXR β: -8.5	LXR β: -6.6	LXR β: -6.4	LXR β: -6.4	LXR β: -9.2
PPAR α	PPAR α: -5.6	PPAR α: -6.3	PPAR α: -7.2	PPAR α: -8.1	PPAR α: -6.3	PPAR α: -4.3	PPAR α: -7.1	PPAR α: -5.6	PPAR α: -5.9	PPAR α: -5.6	PPAR α: -7.3
PPAR β	PPAR β: -5.6	PPAR β: -8.2	PPAR β: -7.3	PPAR β: -8.1	PPAR β: -6.7	PPAR β: -4.2	PPAR β: -7.5	PPAR β: -5.9	PPAR β: -6.4	PPAR β: -5.8	PPAR β: -7.7
PPAR γ	PPAR γ: -5.9	PPAR γ: -9.5	PPAR γ: -8.4	PPAR γ: -8.0	PPAR γ: -6.6	PPAR γ: -4.4	PPAR γ: -7.5	PPAR γ: -6.2	PPAR γ: -5.7	PPAR γ: -5.7	PPAR γ: -6.7
RXR α	RXR α: -8.8	RXR α: -4.1	RXR α: -10.0	RXR α: -8.4	RXR α: -6.2	RXR α: -4.7	RXR α: -8.7	RXR α: -6.5	RXR α: -6.2	RXR α: -5.8	RXR α: -8.2
TR α	TR α: -3.2	TR α: 7.3	TR α: -2.2	TR α: -7.1	TR α: -7.0	TR α: -4.8	TR α: -7.9	TR α: -6.4	TR α: -6.3	TR α: -6.3	TR α: -6.7
TR β	TR β: -6.0	TR β: 0.2	TR β: -3.4	TR β: -6.8	TR β: -6.6	TR β: -4.4	TR β: -8.0	TR β: -6.5	TR β: -6.1	TR β: -6.0	TR β: -7.2

Spojina	Fenoterol	Fentanil	Fesoterodin	Finasterid	Fingolimod	Fitomenadio n	Fludarabin	Flufenazin	Flukonazol	Flumazenil	Fluokortoln
AR	AR : -7.9	AR : -6.3	AR : -2.5	AR : -3.3	AR : -7.0	AR : -2.1	AR : -7.5	AR : -4.9	AR : -7.3	AR : -8.4	AR : -6.9
AR an.	AR an.: -7.4	AR an.: -7.5	AR an.: -5.7	AR an.: -3.4	AR an.: -7.0	AR an.: -4.0	AR an.: -7.8	AR an.: -5.2	AR an.: -8.0	AR an.: -8.5	AR an.: -8.3
ER $\alpha$	ER $\alpha$ : -8.5	ER $\alpha$ : -8.8	ER $\alpha$ : -8.1	ER $\alpha$ : -4.6	ER $\alpha$ : -7.1	ER $\alpha$ : -9.2	ER $\alpha$ : -7.5	ER $\alpha$ : -7.0	ER $\alpha$ : -7.7	ER $\alpha$ : -8.1	ER $\alpha$ : -6.9
ER $\alpha$ an.	ER $\alpha$ an.: -7.8	ER $\alpha$ an.: -9.0	ER $\alpha$ an.: -8.0	ER $\alpha$ an.: -7.0	ER $\alpha$ an.: -7.2	ER $\alpha$ an.: -8.7	ER $\alpha$ an.: -7.5	ER $\alpha$ an.: -8.4	ER $\alpha$ an.: -7.5	ER $\alpha$ an.: -7.9	ER $\alpha$ an.: -7.3
ER $\beta$	ER $\beta$ : -7.9	ER $\beta$ : -7.4	ER $\beta$ : -4.9	ER $\beta$ : -5.0	ER $\beta$ : -7.1	ER $\beta$ : -4.9	ER $\beta$ : -7.2	ER $\beta$ : -4.2	ER $\beta$ : -7.8	ER $\beta$ : -8.5	ER $\beta$ : -6.1
ER $\beta$ an.	ER $\beta$ an.: -8.0	ER $\beta$ an.: -8.6	ER $\beta$ an.: -7.8	ER $\beta$ an.: -7.1	ER $\beta$ an.: -6.8	ER $\beta$ an.: -8.1	ER $\beta$ an.: -8.0	ER $\beta$ an.: -8.3	ER $\beta$ an.: -7.7	ER $\beta$ an.: -7.9	ER $\beta$ an.: -5.9
GR	GR: -7.8	GR: -9.2	GR: -7.9	GR: -9.1	GR: -6.8	GR: -8.5	GR: -7.9	GR: -7.8	GR: -7.5	GR: -8.2	GR: -9.0
GR an.	GR an.: -7.7	GR an.: -8.2	GR an.: -7.9	GR an.: -8.2	GR an.: -5.9	GR an.: -8.0	GR an.: -7.1	GR an.: -8.8	GR an.: -7.1	GR an.: -7.2	GR an.: -8.1
LXR $\alpha$	LXR $\alpha$ : -8.5	LXR $\alpha$ : -9.7	LXR $\alpha$ : -8.1	LXR $\alpha$ : -9.1	LXR $\alpha$ : -7.8	LXR $\alpha$ : -10.0	LXR $\alpha$ : -8.0	LXR $\alpha$ : -8.2	LXR $\alpha$ : -7.9	LXR $\alpha$ : -8.2	LXR $\alpha$ : -8.2
LXR $\beta$	LXR $\beta$ : -8.9	LXR $\beta$ : -10.3	LXR $\beta$ : -9.0	LXR $\beta$ : -10.9	LXR $\beta$ : -7.6	LXR $\beta$ : -10.8	LXR $\beta$ : -8.2	LXR $\beta$ : -9.1	LXR $\beta$ : -8.2	LXR $\beta$ : -8.3	LXR $\beta$ : -9.8
PPAR $\alpha$	PPAR $\alpha$ : -7.6	PPAR $\alpha$ : -8.0	PPAR $\alpha$ : -7.4	PPAR $\alpha$ : -5.5	PPAR $\alpha$ : -6.6	PPAR $\alpha$ : -9.2	PPAR $\alpha$ : -7.2	PPAR $\alpha$ : -8.1	PPAR $\alpha$ : -6.8	PPAR $\alpha$ : -7.9	PPAR $\alpha$ : -6.6
PPAR $\beta$	PPAR $\beta$ : -8.3	PPAR $\beta$ : -9.0	PPAR $\beta$ : -8.1	PPAR $\beta$ : -7.6	PPAR $\beta$ : -7.5	PPAR $\beta$ : -9.6	PPAR $\beta$ : -7.6	PPAR $\beta$ : -8.5	PPAR $\beta$ : -7.1	PPAR $\beta$ : -8.1	PPAR $\beta$ : -5.3
PPAR $\gamma$	PPAR $\gamma$ : -7.8	PPAR $\gamma$ : -8.4	PPAR $\gamma$ : -7.6	PPAR $\gamma$ : -6.8	PPAR $\gamma$ : -6.5	PPAR $\gamma$ : -9.5	PPAR $\gamma$ : -7.4	PPAR $\gamma$ : -8.3	PPAR $\gamma$ : -7.0	PPAR $\gamma$ : -7.6	PPAR $\gamma$ : -6.7
RXR $\alpha$	RXR $\alpha$ : -8.5	RXR $\alpha$ : -8.6	RXR $\alpha$ : -8.5	RXR $\alpha$ : -7.9	RXR $\alpha$ : -7.7	RXR $\alpha$ : -8.7	RXR $\alpha$ : -8.0	RXR $\alpha$ : -8.8	RXR $\alpha$ : -7.7	RXR $\alpha$ : -8.5	RXR $\alpha$ : -5.8
TR $\alpha$	TR $\alpha$ : -9.0	TR $\alpha$ : -8.5	TR $\alpha$ : -4.6	TR $\alpha$ : -5.0	TR $\alpha$ : -8.4	TR $\alpha$ : -5.9	TR $\alpha$ : -6.4	TR $\alpha$ : -4.2	TR $\alpha$ : -7.3	TR $\alpha$ : -7.2	TR $\alpha$ : -3.7
TR $\beta$	TR $\beta$ : -9.2	TR $\beta$ : -9.2	TR $\beta$ : -5.9	TR $\beta$ : -8.3	TR $\beta$ : -8.1	TR $\beta$ : -6.9	TR $\beta$ : -7.0	TR $\beta$ : -7.4	TR $\beta$ : -7.9	TR $\beta$ : -8.3	TR $\beta$ : -7.1

Spojina	Fluoksetin	Fluorodeoks iglukoza	Fluorouracil	Flupentiksol	Flurazepam	Flurbiprofen	Flutrimazol	Fluvastatin	Folkodin	Folna kislina	Formoterol
AR	AR : -8.2	AR : -5.9	AR : -5.4	AR : -2.2	AR : -4.6	AR : -8.6	AR : 2.8	AR : -0.0	AR : -5.9	AR : -3.8	AR : -6.7
AR an.	AR an.: -8.3	AR an.: -5.8	AR an.: -5.3	AR an.: -2.6	AR an.: -5.5	AR an.: -8.4	AR an.: -3.0	AR an.: -4.9	AR an.: -7.6	AR an.: -5.0	AR an.: -7.3
ER $\alpha$	ER $\alpha$ : -8.6	ER $\alpha$ : -5.1	ER $\alpha$ : -5.6	ER $\alpha$ : -7.8	ER $\alpha$ : -7.3	ER $\alpha$ : -7.9	ER $\alpha$ : -8.2	ER $\alpha$ : -8.7	ER $\alpha$ : -9.1	ER $\alpha$ : -7.9	ER $\alpha$ : -7.9
ER $\alpha$ an.	ER $\alpha$ an.: -8.5	ER $\alpha$ an.: -5.4	ER $\alpha$ an.: -4.7	ER $\alpha$ an.: -9.2	ER $\alpha$ an.: -6.8	ER $\alpha$ an.: -8.5	ER $\alpha$ an.: -7.2	ER $\alpha$ an.: -7.8	ER $\alpha$ an.: -8.1	ER $\alpha$ an.: -8.3	ER $\alpha$ an.: -7.7
ER $\beta$	ER $\beta$ : -8.5	ER $\beta$ : -5.8	ER $\beta$ : -5.4	ER $\beta$ : -4.8	ER $\beta$ : -5.6	ER $\beta$ : -7.6	ER $\beta$ : -3.9	ER $\beta$ : -5.2	ER $\beta$ : -5.1	ER $\beta$ : -3.9	ER $\beta$ : -7.7
ER $\beta$ an.	ER $\beta$ an.: -8.3	ER $\beta$ an.: -5.3	ER $\beta$ an.: -5.2	ER $\beta$ an.: -9.2	ER $\beta$ an.: -6.8	ER $\beta$ an.: -7.9	ER $\beta$ an.: -6.5	ER $\beta$ an.: -8.6	ER $\beta$ an.: -6.4	ER $\beta$ an.: -7.4	ER $\beta$ an.: -7.2
GR	GR: -7.9	GR: -5.4	GR: -4.9	GR: -7.7	GR: -8.6	GR: -8.8	GR: -8.9	GR: -7.0	GR: -10.1	GR: -8.8	GR: -8.7
GR an.	GR an.: -7.6	GR an.: -5.0	GR an.: -4.9	GR an.: -9.4	GR an.: -8.4	GR an.: -7.0	GR an.: -8.5	GR an.: -7.4	GR an.: -8.5	GR an.: -8.4	GR an.: -7.8
LXR $\alpha$	LXR $\alpha$ : -9.2	LXR $\alpha$ : -5.5	LXR $\alpha$ : -4.8	LXR $\alpha$ : -9.8	LXR $\alpha$ : -8.9	LXR $\alpha$ : -9.0	LXR $\alpha$ : -4.5	LXR $\alpha$ : -8.2	LXR $\alpha$ : -10.7	LXR $\alpha$ : -9.4	LXR $\alpha$ : -9.0
LXR $\beta$	LXR $\beta$ : -9.0	LXR $\beta$ : -5.9	LXR $\beta$ : -5.1	LXR $\beta$ : -9.9	LXR $\beta$ : -8.0	LXR $\beta$ : -9.3	LXR $\beta$ : -7.7	LXR $\beta$ : -7.9	LXR $\beta$ : -10.7	LXR $\beta$ : -9.8	LXR $\beta$ : -8.9
PPAR $\alpha$	PPAR $\alpha$ : -8.3	PPAR $\alpha$ : -5.5	PPAR $\alpha$ : -5.0	PPAR $\alpha$ : -8.1	PPAR $\alpha$ : -7.7	PPAR $\alpha$ : -8.2	PPAR $\alpha$ : -8.1	PPAR $\alpha$ : -8.4	PPAR $\alpha$ : -7.8	PPAR $\alpha$ : -8.6	PPAR $\alpha$ : -8.1
PPAR $\beta$	PPAR $\beta$ : -8.8	PPAR $\beta$ : -5.6	PPAR $\beta$ : -4.8	PPAR $\beta$ : -8.6	PPAR $\beta$ : -8.8	PPAR $\beta$ : -9.2	PPAR $\beta$ : -8.0	PPAR $\beta$ : -8.2	PPAR $\beta$ : -8.2	PPAR $\beta$ : -8.6	PPAR $\beta$ : -8.2
PPAR $\gamma$	PPAR $\gamma$ : -8.3	PPAR $\gamma$ : -5.5	PPAR $\gamma$ : -5.2	PPAR $\gamma$ : -8.6	PPAR $\gamma$ : -7.3	PPAR $\gamma$ : -8.9	PPAR $\gamma$ : -7.6	PPAR $\gamma$ : -8.5	PPAR $\gamma$ : -7.2	PPAR $\gamma$ : -8.5	PPAR $\gamma$ : -8.1
RXR $\alpha$	RXR $\alpha$ : -8.8	RXR $\alpha$ : -5.7	RXR $\alpha$ : -5.5	RXR $\alpha$ : -9.6	RXR $\alpha$ : -7.9	RXR $\alpha$ : -8.9	RXR $\alpha$ : -7.6	RXR $\alpha$ : -9.7	RXR $\alpha$ : -9.5	RXR $\alpha$ : -8.3	RXR $\alpha$ : -9.0
TR $\alpha$	TR $\alpha$ : -8.6	TR $\alpha$ : -5.1	TR $\alpha$ : -5.5	TR $\alpha$ : -4.7	TR $\alpha$ : -7.3	TR $\alpha$ : -9.0	TR $\alpha$ : -5.7	TR $\alpha$ : -2.7	TR $\alpha$ : -4.8	TR $\alpha$ : -8.6	TR $\alpha$ : -8.2
TR $\beta$	TR $\beta$ : -8.8	TR $\beta$ : -5.3	TR $\beta$ : -5.4	TR $\beta$ : -8.5	TR $\beta$ : -7.5	TR $\beta$ : -9.5	TR $\beta$ : -5.9	TR $\beta$ : -3.0	TR $\beta$ : -8.5	TR $\beta$ : -8.6	TR $\beta$ : -9.2

Spojina	Fosamilceft arolin	Fozinopril	Frovatriptan	Furosemide	Fusidna kislina	Gabapentin	Gadobenska kislina	Gadobutrol	Gadodiamid	Gadoksentin ska kis.	Gadoterna kislina
AR	AR : 7.5	AR : 1.2	AR : -8.0	AR : -7.6	AR : 7.9	AR : -5.9	AR : -3.3	AR : 1.2	AR : -4.9	AR : -1.8	AR : 1.2
AR an.	AR an.: 6.4	AR an.: -0.9	AR an.: -8.4	AR an.: -7.2	AR an.: 4.9	AR an.: -5.7	AR an.: -3.7	AR an.: -3.8	AR an.: -5.5	AR an.: -2.2	AR an.: -3.8
ER $\alpha$	ER $\alpha$ : -5.2	ER $\alpha$ : -6.9	ER $\alpha$ : -8.0	ER $\alpha$ : -7.7	ER $\alpha$ : -4.8	ER $\alpha$ : -5.5	ER $\alpha$ : -6.8	ER $\alpha$ : -3.7	ER $\alpha$ : -5.9	ER $\alpha$ : -6.1	ER $\alpha$ : -3.8
ER $\alpha$ an.	ER $\alpha$ an.: -7.6	ER $\alpha$ an.: -8.3	ER $\alpha$ an.: -7.8	ER $\alpha$ an.: -7.7	ER $\alpha$ an.: -8.6	ER $\alpha$ an.: -5.4	ER $\alpha$ an.: -5.3	ER $\alpha$ an.: -4.9	ER $\alpha$ an.: -5.9	ER $\alpha$ an.: -6.2	ER $\alpha$ an.: -5.2
ER $\beta$	ER $\beta$ : 3.9	ER $\beta$ : -2.9	ER $\beta$ : -7.6	ER $\beta$ : -7.8	ER $\beta$ : 3.5	ER $\beta$ : -5.7	ER $\beta$ : -3.4	ER $\beta$ : -2.2	ER $\beta$ : -5.6	ER $\beta$ : -2.4	ER $\beta$ : -2.2
ER $\beta$ an.	ER $\beta$ an.: -6.9	ER $\beta$ an.: -7.9	ER $\beta$ an.: -7.6	ER $\beta$ an.: -7.4	ER $\beta$ an.: -5.6	ER $\beta$ an.: -5.5	ER $\beta$ an.: -5.8	ER $\beta$ an.: -4.1	ER $\beta$ an.: -5.2	ER $\beta$ an.: -5.5	ER $\beta$ an.: -4.1
GR	GR: -5.9	GR: -7.9	GR: -8.2	GR: -7.8	GR: -4.5	GR: -5.3	GR: -7.6	GR: -5.6	GR: -7.0	GR: -7.4	GR: -5.6
GR an.	GR an.: -8.6	GR an.: -8.2	GR an.: -8.1	GR an.: -6.7	GR an.: -7.8	GR an.: -5.3	GR an.: -6.5	GR an.: -6.3	GR an.: -5.5	GR an.: -6.4	GR an.: -6.3
LXR $\alpha$	LXR $\alpha$ : -8.3	LXR $\alpha$ : -9.4	LXR $\alpha$ : -8.8	LXR $\alpha$ : -8.0	LXR $\alpha$ : -3.8	LXR $\alpha$ : -5.8	LXR $\alpha$ : -7.5	LXR $\alpha$ : -2.8	LXR $\alpha$ : -6.7	LXR $\alpha$ : -7.3	LXR $\alpha$ : -3.9



LXR β	LXR β: -4.9	LXR β: -9.5	LXR β: -9.3	LXR β: -8.1	LXR β: -8.6	LXR β: -6.4	LXR β: -7.8	LXR β: -3.0	LXR β: -6.7	LXR β: -7.5	LXR β: -2.9
PPAR α	PPAR α: -6.7	PPAR α: -7.9	PPAR α: -8.8	PPAR α: -7.3	PPAR α: -1.2	PPAR α: -5.3	PPAR α: -7.0	PPAR α: -4.9	PPAR α: -6.3	PPAR α: -7.1	PPAR α: -4.9
PPAR β	PPAR β: -7.5	PPAR β: -9.5	PPAR β: -8.9	PPAR β: -7.4	PPAR β: -2.0	PPAR β: -5.6	PPAR β: -7.7	PPAR β: -5.6	PPAR β: -6.2	PPAR β: -7.1	PPAR β: -5.6
PPAR γ	PPAR γ: -8.0	PPAR γ: -7.8	PPAR γ: -8.2	PPAR γ: -6.9	PPAR γ: -6.6	PPAR γ: -5.2	PPAR γ: -7.4	PPAR γ: -4.1	PPAR γ: -6.2	PPAR γ: -6.7	PPAR γ: -5.4
RXR α	RXR α: -2.9	RXR α: -8.4	RXR α: -8.5	RXR α: -7.9	RXR α: -2.9	RXR α: -5.6	RXR α: -7.6	RXR α: -5.3	RXR α: -6.3	RXR α: -7.4	RXR α: -5.3
TR α	TR α: 7.8	TR α: -3.0	TR α: -7.5	TR α: -8.2	TR α: 9.5	TR α: -6.1	TR α: -5.6	TR α: -1.2	TR α: -5.4	TR α: -5.1	TR α: -1.2
TR β	TR β: 1.6	TR β: -4.9	TR β: -7.7	TR β: -7.6	TR β: -1.7	TR β: -5.9	TR β: -7.4	TR β: -1.2	TR β: -6.6	TR β: -6.9	TR β: -1.2

Spojina	Gadoverseta mid	Gadopentet na kislina	Galantamin	Gefitinib	Gemcitabine	Gentamicin	Gestoden	Gimeracil	Gliceriltrinitrat	Glicerol	Glicin
AR	AR : -2.6	AR : -5.4	AR : -6.2	AR : -2.0	AR : -7.6	AR : -0.9	AR : -8.5	AR : -5.6	AR : -5.8	AR : -3.8	AR : -3.3
AR an.	AR an.: -3.1	AR an.: -5.9	AR an.: -8.3	AR an.: -4.8	AR an.: -7.7	AR an.: -4.7	AR an.: -8.3	AR an.: -5.4	AR an.: -5.1	AR an.: -4.2	AR an.: -3.2
ER α	ER α: -5.7	ER α: -5.5	ER α: -8.7	ER α: -7.6	ER α: -7.3	ER α: -4.0	ER α: -8.6	ER α: -5.3	ER α: -4.6	ER α: -3.7	ER α: -3.2
ER α an.	ER α an.: -5.3	ER α an.: -5.7	ER α an.: -7.8	ER α an.: -7.7	ER α an.: -7.2	ER α an.: -5.6	ER α an.: -9.0	ER α an.: -5.0	ER α an.: -4.5	ER α an.: -3.6	ER α an.: -3.2
ER β	ER β: -4.3	ER β: -5.9	ER β: -8.1	ER β: -4.5	ER β: -7.5	ER β: -3.0	ER β: -6.9	ER β: -5.1	ER β: -4.9	ER β: -3.6	ER β: -3.2
ER β an.	ER β an.: -5.2	ER β an.: -5.4	ER β an.: -7.3	ER β an.: -7.4	ER β an.: -7.3	ER β an.: -5.8	ER β an.: -6.9	ER β an.: -4.8	ER β an.: -4.5	ER β an.: -3.5	ER β an.: -3.1
GR	GR: -6.9	GR: -6.5	GR: -7.4	GR: -9.0	GR: -7.2	GR: -7.8	GR: -8.8	GR: -5.1	GR: -5.7	GR: -4.0	GR: -3.3
GR an.	GR an.: -5.5	GR an.: -5.5	GR an.: -7.3	GR an.: -8.8	GR an.: -6.5	GR an.: -7.4	GR an.: -8.2	GR an.: -4.8	GR an.: -4.5	GR an.: -3.9	GR an.: -3.1
LXR α	LXR α: -6.5	LXR α: -6.3	LXR α: -8.8	LXR α: -9.5	LXR α: -7.2	LXR α: -8.2	LXR α: -10.3	LXR α: -5.0	LXR α: -4.9	LXR α: -3.6	LXR α: -3.0
LXR β	LXR β: -6.6	LXR β: -6.1	LXR β: -8.5	LXR β: -9.9	LXR β: -7.5	LXR β: -8.3	LXR β: -10.1	LXR β: -5.2	LXR β: -5.0	LXR β: -3.6	LXR β: -3.0
PPAR α	PPAR α: -6.5	PPAR α: -6.0	PPAR α: -8.5	PPAR α: -8.6	PPAR α: -7.0	PPAR α: -5.8	PPAR α: -6.6	PPAR α: -5.2	PPAR α: -4.8	PPAR α: -3.6	PPAR α: -3.0
PPAR β	PPAR β: -6.2	PPAR β: -5.8	PPAR β: -6.6	PPAR β: -8.8	PPAR β: -6.8	PPAR β: -7.3	PPAR β: -7.5	PPAR β: -5.2	PPAR β: -5.0	PPAR β: -3.5	PPAR β: -3.3
PPAR γ	PPAR γ: -6.4	PPAR γ: -5.7	PPAR γ: -6.7	PPAR γ: -8.6	PPAR γ: -6.7	PPAR γ: -6.1	PPAR γ: -6.8	PPAR γ: -5.0	PPAR γ: -4.9	PPAR γ: -3.7	PPAR γ: -3.0
RXR α	RXR α: -6.7	RXR α: -6.8	RXR α: -8.6	RXR α: -9.5	RXR α: -6.5	RXR α: -7.2	RXR α: -8.7	RXR α: -5.5	RXR α: -5.6	RXR α: -4.0	RXR α: -3.3
TR α	TR α: -5.0	TR α: -5.9	TR α: -6.5	TR α: -6.6	TR α: -6.9	TR α: -2.2	TR α: -6.1	TR α: -5.3	TR α: -5.1	TR α: -4.1	TR α: -3.5
TR β	TR β: -5.6	TR β: -6.2	TR β: -8.1	TR β: -6.1	TR β: -6.8	TR β: -2.6	TR β: -8.0	TR β: -4.8	TR β: -5.1	TR β: -4.1	TR β: -3.5

Spojina	Gliklazid	Glikopironij	Glukoza	Glukozamin	Glutamin	Glutaminska kislina	Glutacion	Granisetron	Gvaifenezin	Haloperidol	Heksaminol evulinat
AR	AR : -5.1	AR : -7.7	AR : -5.5	AR : -5.3	AR : -5.0	AR : -5.0	AR : -6.1	AR : -7.1	AR : -6.0	AR : -7.4	AR : -5.6
AR an.	AR an.: -8.0	AR an.: -8.4	AR an.: -5.8	AR an.: -5.0	AR an.: -4.8	AR an.: -4.8	AR an.: -6.6	AR an.: -7.9	AR an.: -5.9	AR an.: -8.2	AR an.: -5.4
ER α	ER α: -9.1	ER α: -8.2	ER α: -5.3	ER α: -4.8	ER α: -5.0	ER α: -4.5	ER α: -6.1	ER α: -8.9	ER α: -5.6	ER α: -9.2	ER α: -5.5
ER α an.	ER α an.: -9.7	ER α an.: -8.7	ER α an.: -5.6	ER α an.: -4.5	ER α an.: -4.6	ER α an.: -4.7	ER α an.: -6.1	ER α an.: -9.1	ER α an.: -5.4	ER α an.: -8.9	ER α an.: -5.6
ER β	ER β: -7.7	ER β: -8.1	ER β: -5.1	ER β: -5.0	ER β: -4.6	ER β: -4.4	ER β: -5.9	ER β: -7.5	ER β: -6.0	ER β: -8.2	ER β: -5.7
ER β an.	ER β an.: -8.7	ER β an.: -8.1	ER β an.: -5.2	ER β an.: -4.3	ER β an.: -4.6	ER β an.: -4.5	ER β an.: -5.9	ER β an.: -7.9	ER β an.: -5.2	ER β an.: -8.6	ER β an.: -5.6
GR	GR: -7.6	GR: -8.3	GR: -5.3	GR: -5.4	GR: -5.1	GR: -5.1	GR: -6.2	GR: -9.0	GR: -6.1	GR: -9.4	GR: -5.7
GR an.	GR an.: -8.1	GR an.: -7.4	GR an.: -4.8	GR an.: -4.9	GR an.: -4.7	GR an.: -4.4	GR an.: -5.6	GR an.: -8.6	GR an.: -4.9	GR an.: -8.2	GR an.: -4.8
LXR α	LXR α: -10.9	LXR α: -8.8	LXR α: -5.6	LXR α: -5.3	LXR α: -4.6	LXR α: -4.5	LXR α: -6.3	LXR α: -9.8	LXR α: -6.3	LXR α: -10.4	LXR α: -5.7
LXR β	LXR β: -9.4	LXR β: -8.8	LXR β: -5.7	LXR β: -5.4	LXR β: -4.8	LXR β: -4.6	LXR β: -5.9	LXR β: -10.6	LXR β: -5.8	LXR β: -10.6	LXR β: -5.7
PPAR α	PPAR α: -7.5	PPAR α: -7.6	PPAR α: -5.7	PPAR α: -5.3	PPAR α: -4.8	PPAR α: -4.4	PPAR α: -5.8	PPAR α: -7.6	PPAR α: -5.7	PPAR α: -8.5	PPAR α: -5.6
PPAR β	PPAR β: -9.9	PPAR β: -7.3	PPAR β: -6.2	PPAR β: -5.6	PPAR β: -4.7	PPAR β: -4.8	PPAR β: -6.3	PPAR β: -7.6	PPAR β: -5.5	PPAR β: -9.3	PPAR β: -5.5
PPAR γ	PPAR γ: -7.7	PPAR γ: -7.4	PPAR γ: -5.0	PPAR γ: -4.8	PPAR γ: -4.5	PPAR γ: -4.3	PPAR γ: -5.7	PPAR γ: -8.1	PPAR γ: -5.4	PPAR γ: -8.9	PPAR γ: -5.7
RXR α	RXR α: -10.6	RXR α: -8.0	RXR α: -5.4	RXR α: -4.5	RXR α: -5.0	RXR α: -5.0	RXR α: -6.6	RXR α: -8.8	RXR α: -6.1	RXR α: -10.5	RXR α: -6.0
TR α	TR α: -6.7	TR α: -8.0	TR α: -5.5	TR α: -3.7	TR α: -5.3	TR α: -4.9	TR α: -6.5	TR α: -8.6	TR α: -6.5	TR α: -7.6	TR α: -6.2
TR β	TR β: -6.5	TR β: -8.7	TR β: -5.0	TR β: -4.5	TR β: -4.8	TR β: -4.7	TR β: -6.6	TR β: -8.6	TR β: -6.6	TR β: -10.0	TR β: -6.0

Spojina	Hemin	Hesperidin	Hidrikloroti azid	Hidrokortiz onbutirat	Hidroksiseč nina	Histamin	Histidin	Holekalcifer ol	Ibandronska kislina	Ibuprofen	Idarubicin
AR	AR : 33.6	AR : 9.6	AR : -7.1	AR : -3.6	AR : -4.0	AR : -4.2	AR : -5.6	AR : -2.0	AR : -6.0	AR : -7.3	AR : 6.5
AR an.	AR an.: 31.1	AR an.: 7.2	AR an.: -7.4	AR an.: -4.1	AR an.: -4.1	AR an.: -4.4	AR an.: -5.2	AR an.: -3.1	AR an.: -6.0	AR an.: -7.1	AR an.: 3.5
ER $\alpha$	ER $\alpha$ : -3.9	ER $\alpha$ : -5.7	ER $\alpha$ : -6.6	ER $\alpha$ : -4.1	ER $\alpha$ : -4.1	ER $\alpha$ : -5.0	ER $\alpha$ : -5.0	ER $\alpha$ : -6.7	ER $\alpha$ : -6.2	ER $\alpha$ : -6.9	ER $\alpha$ : -5.2
ER $\alpha$ an.	ER $\alpha$ an.: -7.5	ER $\alpha$ an.: -7.9	ER $\alpha$ an.: -7.2	ER $\alpha$ an.: -6.7	ER $\alpha$ an.: -3.9	ER $\alpha$ an.: -4.3	ER $\alpha$ an.: -4.7	ER $\alpha$ an.: -8.2	ER $\alpha$ an.: -5.6	ER $\alpha$ an.: -6.9	ER $\alpha$ an.: -7.6
ER $\beta$	ER $\beta$ : 17.8	ER $\beta$ : 5.3	ER $\beta$ : -7.0	ER $\beta$ : -4.1	ER $\beta$ : -3.7	ER $\beta$ : -4.3	ER $\beta$ : -4.9	ER $\beta$ : -2.7	ER $\beta$ : -6.1	ER $\beta$ : -7.1	ER $\beta$ : 5.8
ER $\beta$ an.	ER $\beta$ an.: -6.3	ER $\beta$ an.: -7.0	ER $\beta$ an.: -6.7	ER $\beta$ an.: -5.8	ER $\beta$ an.: -3.9	ER $\beta$ an.: -4.6	ER $\beta$ an.: -4.6	ER $\beta$ an.: -7.6	ER $\beta$ an.: -5.9	ER $\beta$ an.: -6.9	ER $\beta$ an.: -7.1
GR	GR: 8.3	GR: -9.3	GR: -7.1	GR: -6.9	GR: -3.7	GR: -4.0	GR: -5.2	GR: -9.4	GR: -6.0	GR: -7.2	GR: -6.7
GR an.	GR an.: -6.3	GR an.: -9.8	GR an.: -6.2	GR an.: -8.1	GR an.: -4.4	GR an.: -4.4	GR an.: -5.2	GR an.: -8.9	GR an.: -5.4	GR an.: -6.2	GR an.: -9.2
LXR $\alpha$	LXR $\alpha$ : -1.8	LXR $\alpha$ : -10.0	LXR $\alpha$ : -7.7	LXR $\alpha$ : -8.0	LXR $\alpha$ : -3.8	LXR $\alpha$ : -4.3	LXR $\alpha$ : -5.1	LXR $\alpha$ : -11.5	LXR $\alpha$ : -6.2	LXR $\alpha$ : -7.6	LXR $\alpha$ : -9.1
LXR $\beta$	LXR $\beta$ : 18.6	LXR $\beta$ : -4.8	LXR $\beta$ : -8.0	LXR $\beta$ : -9.7	LXR $\beta$ : -4.1	LXR $\beta$ : -4.5	LXR $\beta$ : -5.3	LXR $\beta$ : -11.1	LXR $\beta$ : -6.6	LXR $\beta$ : -7.8	LXR $\beta$ : -10.7
PPAR $\alpha$	PPAR $\alpha$ : 4.4	PPAR $\alpha$ : -9.2	PPAR $\alpha$ : -7.7	PPAR $\alpha$ : -3.6	PPAR $\alpha$ : -4.2	PPAR $\alpha$ : -4.5	PPAR $\alpha$ : -5.0	PPAR $\alpha$ : -7.8	PPAR $\alpha$ : -6.6	PPAR $\alpha$ : -7.1	PPAR $\alpha$ : -7.3
PPAR $\beta$	PPAR $\beta$ : 0.4	PPAR $\beta$ : -10.1	PPAR $\beta$ : -7.1	PPAR $\beta$ : -5.4	PPAR $\beta$ : -4.0	PPAR $\beta$ : -4.4	PPAR $\beta$ : -5.1	PPAR $\beta$ : -9.5	PPAR $\beta$ : -6.3	PPAR $\beta$ : -7.2	PPAR $\beta$ : -8.1
PPAR $\gamma$	PPAR $\gamma$ : -7.5	PPAR $\gamma$ : -9.0	PPAR $\gamma$ : -6.5	PPAR $\gamma$ : -5.8	PPAR $\gamma$ : -3.6	PPAR $\gamma$ : -4.3	PPAR $\gamma$ : -4.8	PPAR $\gamma$ : -7.9	PPAR $\gamma$ : -6.1	PPAR $\gamma$ : -7.0	PPAR $\gamma$ : -9.2
RXR $\alpha$	RXR $\alpha$ : -1.5	RXR $\alpha$ : -6.4	RXR $\alpha$ : -7.5	RXR $\alpha$ : -4.5	RXR $\alpha$ : -3.8	RXR $\alpha$ : -4.2	RXR $\alpha$ : -5.0	RXR $\alpha$ : -10.9	RXR $\alpha$ : -6.1	RXR $\alpha$ : -7.4	RXR $\alpha$ : -3.6
TR $\alpha$	TR $\alpha$ : 28.7	TR $\alpha$ : 4.3	TR $\alpha$ : -6.2	TR $\alpha$ : -1.3	TR $\alpha$ : -4.6	TR $\alpha$ : -4.7	TR $\alpha$ : -5.4	TR $\alpha$ : -7.7	TR $\alpha$ : -5.8	TR $\alpha$ : -7.6	TR $\alpha$ : 4.6
TR $\beta$	TR $\beta$ : 31.2	TR $\beta$ : 0.0	TR $\beta$ : -6.9	TR $\beta$ : -1.6	TR $\beta$ : -4.3	TR $\beta$ : -4.7	TR $\beta$ : -5.3	TR $\beta$ : -7.2	TR $\beta$ : -5.9	TR $\beta$ : -7.7	TR $\beta$ : -2.5

Spojina	Idelalizib	Ifosfamid	Iloprost	Imikvimod	Imipenem	Indometacin	Indakaterol	Ingenol mebutat	Ipratropijev bromid	Itrakonazol	Ivabradin
AR	AR : -3.7	AR : -5.9	AR : -4.8	AR : -6.9	AR an.: -6.8	AR : -3.6	AR : -5.1	AR : -0.9	AR : -7.0	AR : 15.1	AR : -1.1
AR an.	AR an.: -6.4	AR an.: -5.8	AR an.: -3.5	AR an.: -7.2	AR : -6.7	AR an.: -5.6	AR an.: -6.9	AR an.: -3.9	AR an.: -8.1	AR an.: 12.2	AR an.: -3.0
ER $\alpha$	ER $\alpha$ : -7.2	ER $\alpha$ : -5.2	ER $\alpha$ : -8.6	ER $\alpha$ : -7.7	ER $\alpha$ : -7.3	ER $\alpha$ : -7.6	ER $\alpha$ : -8.6	ER $\alpha$ : -4.8	ER $\alpha$ : -7.6	ER $\alpha$ : -8.1	ER $\alpha$ : -7.8
ER $\alpha$ an.	ER $\alpha$ an.: -7.1	ER $\alpha$ an.: -5.5	ER $\alpha$ an.: -8.2	ER $\alpha$ an.: -7.1	ER $\alpha$ an.: -6.9	ER $\alpha$ an.: -7.4	ER $\alpha$ an.: -7.0	ER $\alpha$ an.: -7.5	ER $\alpha$ an.: -8.3	ER $\alpha$ an.: -9.0	ER $\alpha$ an.: -8.1
ER $\beta$	ER $\beta$ : -4.5	ER $\beta$ : -5.4	ER $\beta$ : -4.9	ER $\beta$ : -7.8	ER $\beta$ : -6.3	ER $\beta$ : -5.7	ER $\beta$ : -7.5	ER $\beta$ : -5.2	ER $\beta$ : -7.5	ER $\beta$ : 8.7	ER $\beta$ : -2.2
ER $\beta$ an.	ER $\beta$ an.: -7.0	ER $\beta$ an.: -5.1	ER $\beta$ an.: -7.9	ER $\beta$ an.: -8.1	ER $\beta$ an.: -6.3	ER $\beta$ an.: -6.1	ER $\beta$ an.: -8.2	ER $\beta$ an.: -5.6	ER $\beta$ an.: -7.1	ER $\beta$ an.: -8.2	ER $\beta$ an.: -7.5
GR	GR: -8.7	GR: -5.2	GR: -9.4	GR: -7.8	GR: -6.6	GR: -8.8	GR: -10.3	GR: -6.4	GR: -8.7	GR: -6.0	GR: -8.0
GR an.	GR an.: -9.2	GR an.: -4.9	GR an.: -8.0	GR an.: -7.1	GR an.: -5.8	GR an.: -7.5	GR an.: -8.9	GR an.: -7.5	GR an.: -7.6	GR an.: -9.6	GR an.: -8.6
LXR $\alpha$	LXR $\alpha$ : -10.9	LXR $\alpha$ : -6.0	LXR $\alpha$ : -9.9	LXR $\alpha$ : -8.5	LXR $\alpha$ : -6.9	LXR $\alpha$ : -7.3	LXR $\alpha$ : -10.7	LXR $\alpha$ : -7.5	LXR $\alpha$ : -9.5	LXR $\alpha$ : -9.6	LXR $\alpha$ : -9.7
LXR $\beta$	LXR $\beta$ : -10.5	LXR $\beta$ : -5.8	LXR $\beta$ : -10.7	LXR $\beta$ : -8.3	LXR $\beta$ : -6.9	LXR $\beta$ : -8.3	LXR $\beta$ : -11.6	LXR $\beta$ : -8.5	LXR $\beta$ : -9.3	LXR $\beta$ : -2.8	LXR $\beta$ : -9.9
PPAR $\alpha$	PPAR $\alpha$ : -9.1	PPAR $\alpha$ : -5.1	PPAR $\alpha$ : -9.1	PPAR $\alpha$ : -7.4	PPAR $\alpha$ : -6.2	PPAR $\alpha$ : -7.7	PPAR $\alpha$ : -8.7	PPAR $\alpha$ : -5.0	PPAR $\alpha$ : -6.9	PPAR $\alpha$ : -8.0	PPAR $\alpha$ : -8.9
PPAR $\beta$	PPAR $\beta$ : -8.7	PPAR $\beta$ : -5.3	PPAR $\beta$ : -10.0	PPAR $\beta$ : -8.2	PPAR $\beta$ : -6.9	PPAR $\beta$ : -7.0	PPAR $\beta$ : -9.5	PPAR $\beta$ : -5.9	PPAR $\beta$ : -8.9	PPAR $\beta$ : -9.7	PPAR $\beta$ : -8.8
PPAR $\gamma$	PPAR $\gamma$ : -9.9	PPAR $\gamma$ : -5.6	PPAR $\gamma$ : -10.0	PPAR $\gamma$ : -7.5	PPAR $\gamma$ : -7.1	PPAR $\gamma$ : -7.5	PPAR $\gamma$ : -9.5	PPAR $\gamma$ : -7.0	PPAR $\gamma$ : -7.1	PPAR $\gamma$ : -9.8	PPAR $\gamma$ : -8.7
RXR $\alpha$	RXR $\alpha$ : -8.4	RXR $\alpha$ : -5.6	RXR $\alpha$ : -10.1	RXR $\alpha$ : -7.9	RXR $\alpha$ : -6.6	RXR $\alpha$ : -8.5	RXR $\alpha$ : -9.9	RXR $\alpha$ : -5.1	RXR $\alpha$ : -8.5	RXR $\alpha$ : -3.0	RXR $\alpha$ : -9.1
TR $\alpha$	TR $\alpha$ : -4.2	TR $\alpha$ : -5.7	TR $\alpha$ : -6.6	TR $\alpha$ : -7.8	TR $\alpha$ : -6.3	TR $\alpha$ : -5.7	TR $\alpha$ : -7.3	TR $\alpha$ : 0.2	TR $\alpha$ : -7.2	TR $\alpha$ : 7.5	TR $\alpha$ : -3.1
TR $\beta$	TR $\beta$ : -8.4	TR $\beta$ : -5.6	TR $\beta$ : -8.0	TR $\beta$ : -8.0	TR $\beta$ : -6.8	TR $\beta$ : -6.4	TR $\beta$ : -9.0	TR $\beta$ : -2.4	TR $\beta$ : -8.9	TR $\beta$ : 6.6	TR $\beta$ : -5.3

Spojina	Ivakaftor	Izofluran	Izolevcin	Izoniazid	Izopropilalk ohol	Izosorbidmo nonitrat	Isotretinoin	Jabolčna kislina	Kalcijev dobesilat	Kalcijev pantotenat	Kalciprotiol
AR	AR : -3.0	AR : -5.7	AR : -5.0	AR : -5.6	AR : -3.4	AR : -6.0	AR : -2.3	AR : -4.8	AR : -5.9	AR : -5.9	AR : -0.5
AR an.	AR an.: -3.6	AR an.: -5.8	AR an.: -5.1	AR an.: -5.6	AR an.: -3.2	AR an.: -5.8	AR an.: -0.8	AR an.: -4.6	AR an.: -5.8	AR an.: -5.7	AR an.: -6.1
ER $\alpha$	ER $\alpha$ : -5.2	ER $\alpha$ : -5.1	ER $\alpha$ : -4.7	ER $\alpha$ : -5.8	ER $\alpha$ : -3.0	ER $\alpha$ : -5.4	ER $\alpha$ : -7.3	ER $\alpha$ : -4.4	ER $\alpha$ : -5.6	ER $\alpha$ : -5.4	ER $\alpha$ : -7.0
ER $\alpha$ an.	ER $\alpha$ an.: -7.4	ER $\alpha$ an.: -5.1	ER $\alpha$ an.: -4.4	ER $\alpha$ an.: -5.2	ER $\alpha$ an.: -3.0	ER $\alpha$ an.: -5.3	ER $\alpha$ an.: -8.1	ER $\alpha$ an.: -4.1	ER $\alpha$ an.: -5.9	ER $\alpha$ an.: -5.4	ER $\alpha$ an.: -8.7
ER $\beta$	ER $\beta$ : -3.5	ER $\beta$ : -5.1	ER $\beta$ : -4.7	ER $\beta$ : -5.4	ER $\beta$ : -3.1	ER $\beta$ : -5.5	ER $\beta$ : -2.3	ER $\beta$ : -4.2	ER $\beta$ : -5.6	ER $\beta$ : -5.6	ER $\beta$ : -4.0
ER $\beta$ an.	ER $\beta$ an.: -7.7	ER $\beta$ an.: -4.9	ER $\beta$ an.: -4.5	ER $\beta$ an.: -5.5	ER $\beta$ an.: -3.0	ER $\beta$ an.: -5.2	ER $\beta$ an.: -7.6	ER $\beta$ an.: -4.1	ER $\beta$ an.: -5.5	ER $\beta$ an.: -5.3	ER $\beta$ an.: -7.6
GR	GR: -9.0	GR: -4.9	GR: -4.9	GR: -5.4	GR: -3.2	GR: -5.7	GR: -9.0	GR: -5.1	GR: -5.6	GR: -5.6	GR: -9.8
GR an.	GR an.: -8.8	GR an.: -5.1	GR an.: -4.7	GR an.: -5.5	GR an.: -3.1	GR an.: -5.1	GR an.: -7.5	GR an.: -4.2	GR an.: -5.3	GR an.: -4.8	GR an.: -8.4
LXR $\alpha$	LXR $\alpha$ : -11.3	LXR $\alpha$ : -5.2	LXR $\alpha$ : -4.9	LXR $\alpha$ : -5.4	LXR $\alpha$ : -3.0	LXR $\alpha$ : -5.3	LXR $\alpha$ : -10.3	LXR $\alpha$ : -4.1	LXR $\alpha$ : -5.9	LXR $\alpha$ : -5.4	LXR $\alpha$ : -10.7

LXR β	LXR β: -11.2	LXR β: -5.2	LXR β: -4.8	LXR β: -5.8	LXR β: -3.1	LXR β: -5.5	LXR β: -10.3	LXR β: -4.4	LXR β: -6.0	LXR β: -5.8	LXR β: -11.5
PPAR α	PPAR α: -8.9	PPAR α: -5.1	PPAR α: -4.7	PPAR α: -5.6	PPAR α: -3.1	PPAR α: -5.3	PPAR α: -8.2	PPAR α: -4.1	PPAR α: -5.8	PPAR α: -5.6	PPAR α: -8.0
PPAR β	PPAR β: -9.3	PPAR β: -5.3	PPAR β: -4.5	PPAR β: -5.6	PPAR β: -2.9	PPAR β: -5.8	PPAR β: -7.9	PPAR β: -4.1	PPAR β: -5.7	PPAR β: -5.8	PPAR β: -7.4
PPAR γ	PPAR γ: -8.4	PPAR γ: -5.2	PPAR γ: -4.7	PPAR γ: -5.2	PPAR γ: -3.2	PPAR γ: -5.4	PPAR γ: -8.4	PPAR γ: -4.1	PPAR γ: -5.6	PPAR γ: -5.8	PPAR γ: -7.3
RXR α	RXR α: -9.0	RXR α: -5.2	RXR α: -5.1	RXR α: -5.8	RXR α: -3.1	RXR α: -5.7	RXR α: -8.6	RXR α: -5.2	RXR α: -5.7	RXR α: -6.0	RXR α: -8.5
TR α	TR α: -3.9	TR α: -5.2	TR α: -4.8	TR α: -5.3	TR α: -3.4	TR α: -5.2	TR α: -8.6	TR α: -4.4	TR α: -5.6	TR α: -5.7	TR α: -5.6
TR β	TR β: -6.5	TR β: -5.4	TR β: -4.8	TR β: -5.3	TR β: -3.1	TR β: -5.4	TR β: -9.0	TR β: -4.3	TR β: -5.8	TR β: -5.8	TR β: -8.0

Spojina	Kalcitriol	Kamfen	Kapecitabin	Kapsaicin	Kaptopril	Karbahol	Karbidopa	Karglumins ka kislina	Karvedilol	Ketoprofen	Ketotifen
AR	AR : -3.3	AR : -6.1	AR : -7.0	AR : -7.1	AR : -5.8	AR : -4.7	AR : -7.3	AR : -5.6	AR : -6.1	AR : -8.3	AR : -1.1
AR an.	AR an. : -3.5	AR an. : -6.4	AR an. : -7.1	AR an. : -7.1	AR an. : -5.6	AR an. : -4.5	AR an. : -7.0	AR an. : -5.7	AR an. : -6.6	AR an. : -8.2	AR an. : -6.6
ER α	ER α : -5.8	ER α : -5.6	ER α : -7.4	ER α : -7.6	ER α : -5.4	ER α : -4.3	ER α : -6.8	ER α : -5.4	ER α : -7.7	ER α : -8.4	ER α : -8.9
ER α an.	ER α an. : -8.2	ER α an. : -5.9	ER α an. : -7.4	ER α an. : -7.7	ER α an. : -5.6	ER α an. : -4.4	ER α an. : -6.5	ER α an. : -5.2	ER α an. : -8.4	ER α an. : -8.1	ER α an. : -8.5
ER β	ER β : -3.6	ER β : -6.0	ER β : -7.4	ER β : -7.7	ER β : -5.6	ER β : -4.5	ER β : -6.7	ER β : -5.2	ER β : -7.4	ER β : -8.5	ER β : -7.2
ER β an.	ER β an. : -7.2	ER β an. : -5.7	ER β an. : -7.1	ER β an. : -7.6	ER β an. : -5.5	ER β an. : -4.3	ER β an. : -6.5	ER β an. : -4.7	ER β an. : -8.2	ER β an. : -8.3	ER β an. : -9.1
GR	GR: -9.6	GR: -5.2	GR: -8.4	GR: -7.8	GR: -5.4	GR: -4.2	GR: -6.6	GR: -5.7	GR: -9.5	GR: -8.4	GR: -7.6
GR an.	GR an. : -8.8	GR an. : -5.6	GR an. : -7.2	GR an. : -6.8	GR an. : -5.1	GR an. : -4.1	GR an. : -5.7	GR an. : -4.8	GR an. : -8.0	GR an. : -7.6	GR an. : -8.3
LXR α	LXR α: -11.0	LXR α: -6.5	LXR α: -8.3	LXR α: -8.6	LXR α: -6.1	LXR α: -4.3	LXR α: -6.8	LXR α: -5.2	LXR α: -9.9	LXR α: -9.2	LXR α: -7.9
LXR β	LXR β: -11.0	LXR β: -6.4	LXR β: -8.6	LXR β: -8.6	LXR β: -6.2	LXR β: -4.4	LXR β: -7.0	LXR β: -5.7	LXR β: -9.9	LXR β: -9.2	LXR β: -8.8
PPAR α	PPAR α: -8.1	PPAR α: -5.4	PPAR α: -7.2	PPAR α: -7.5	PPAR α: -5.6	PPAR α: -4.3	PPAR α: -7.1	PPAR α: -5.2	PPAR α: -9.1	PPAR α: -8.8	PPAR α: -8.6
PPAR β	PPAR β: -8.7	PPAR β: -6.0	PPAR β: -7.7	PPAR β: -8.1	PPAR β: -5.4	PPAR β: -4.6	PPAR β: -6.6	PPAR β: -5.5	PPAR β: -9.4	PPAR β: -8.9	PPAR β: -8.3
PPAR γ	PPAR γ: -7.6	PPAR γ: -5.0	PPAR γ: -7.6	PPAR γ: -7.7	PPAR γ: -5.3	PPAR γ: -4.1	PPAR γ: -6.3	PPAR γ: -5.1	PPAR γ: -9.1	PPAR γ: -7.7	PPAR γ: -7.9
RXR α	RXR α: -9.1	RXR α: -6.4	RXR α: -8.4	RXR α: -8.8	RXR α: -5.8	RXR α: -4.2	RXR α: -6.8	RXR α: -5.7	RXR α: -8.9	RXR α: -9.1	RXR α: -7.8
TR α	TR α: -6.8	TR α: -6.3	TR α: -7.9	TR α: -8.8	TR α: -5.8	TR α: -4.4	TR α: -7.1	TR α: -5.4	TR α: -8.1	TR α: -9.3	TR α: -1.5
TR β	TR β: -7.9	TR β: -6.1	TR β: -7.6	TR β: -8.4	TR β: -5.8	TR β: -4.5	TR β: -6.9	TR β: -5.4	TR β: -8.5	TR β: -9.2	TR β: -5.4

Spojina	Kinagolid	Kinapril	Kladribin	Klaritromicini	Klavulanska kislina	Klemastin	Klindamicin	Klofarabin	Klometiazol	Ketamine	Kloksacilin
AR	AR : -5.2	AR : -3.2	AR : -7.6	AR : 73.2	AR : -6.2	AR : -5.5	AR : -2.6	AR : -7.8	AR : -5.0	AR : -6.9	AR : -1.9
AR an.	AR an. : -6.3	AR an. : -6.4	AR an. : -7.9	AR an. : 60.9	AR an. : -6.1	AR an. : -7.5	AR an. : -4.2	AR an. : -8.1	AR an. : -4.9	AR an. : -7.4	AR an. : -3.7
ER α	ER α : -6.1	ER α : -7.5	ER α : -7.1	ER α : 2.4	ER α : -5.6	ER α : -8.8	ER α : -6.8	ER α : -7.1	ER α : -4.5	ER α : -7.7	ER α : -5.0
ER α an.	ER α an. : -6.5	ER α an. : -7.6	ER α an. : -6.9	ER α an. : 1.1	ER α an. : -5.8	ER α an. : -8.7	ER α an. : -5.9	ER α an. : -7.3	ER α an. : -4.3	ER α an. : -7.3	ER α an. : -7.2
ER β	ER β : -4.5	ER β : -5.6	ER β : -7.8	ER β : 63.9	ER β : -6.2	ER β : -8.0	ER β : -4.9	ER β : -7.5	ER β : -4.6	ER β : -7.3	ER β : -5.0
ER β an.	ER β an. : -6.3	ER β an. : -8.0	ER β an. : -7.0	ER β an. : -5.0	ER β an. : -5.6	ER β an. : -8.5	ER β an. : -5.7	ER β an. : -7.3	ER β an. : -4.3	ER β an. : -7.8	ER β an. : -6.3
GR	GR: -7.5	GR: -9.6	GR: -7.1	GR: 40.2	GR: -5.9	GR: -8.3	GR: -7.8	GR: -7.2	GR: -4.9	GR: -7.1	GR: -8.7
GR an.	GR an. : -7.7	GR an. : -8.7	GR an. : -6.7	GR an. : 17.4	GR an. : -5.8	GR an. : -7.9	GR an. : -6.4	GR an. : -6.7	GR an. : -4.5	GR an. : -7.1	GR an. : -9.4
LXR α	LXR α: -7.7	LXR α: -9.2	LXR α: -7.6	LXR α: 20.4	LXR α: -5.9	LXR α: -10.1	LXR α: -8.3	LXR α: -8.0	LXR α: -4.8	LXR α: -7.8	LXR α: -8.3
LXR β	LXR β: -8.4	LXR β: -9.7	LXR β: -7.5	LXR β: 52.9	LXR β: -6.2	LXR β: -9.1	LXR β: -8.8	LXR β: -7.9	LXR β: -4.8	LXR β: -7.8	LXR β: -10.1
PPAR α	PPAR α: -6.4	PPAR α: -8.6	PPAR α: -7.3	PPAR α: 29.5	PPAR α: -5.8	PPAR α: -8.0	PPAR α: -7.1	PPAR α: -7.8	PPAR α: -4.4	PPAR α: -7.1	PPAR α: -7.3
PPAR β	PPAR β: -8.0	PPAR β: -9.4	PPAR β: -7.1	PPAR β: 31.9	PPAR β: -5.8	PPAR β: -8.4	PPAR β: -7.5	PPAR β: -7.4	PPAR β: -4.7	PPAR β: -6.4	PPAR β: -6.6
PPAR γ	PPAR γ: -7.6	PPAR γ: -9.1	PPAR γ: -6.7	PPAR γ: 7.8	PPAR γ: -5.5	PPAR γ: -8.4	PPAR γ: -6.7	PPAR γ: -6.8	PPAR γ: -4.7	PPAR γ: -5.8	PPAR γ: -6.6
RXR α	RXR α: -7.4	RXR α: -8.9	RXR α: -7.4	RXR α: 41.1	RXR α: -5.7	RXR α: -8.8	RXR α: -7.0	RXR α: -7.4	RXR α: -5.0	RXR α: -7.4	RXR α: -8.7
TR α	TR α: -3.0	TR α: -7.9	TR α: -7.6	TR α: 61.2	TR α: -6.3	TR α: -7.2	TR α: -5.2	TR α: -7.6	TR α: -4.7	TR α: -6.9	TR α: -3.2
TR β	TR β: -6.2	TR β: -8.8	TR β: -7.5	TR β: 67.2	TR β: -6.0	TR β: -9.1	TR β: -6.6	TR β: -7.7	TR β: -4.7	TR β: -7.9	TR β: -3.8

Spojina	Klopamid	Klopidogrel	Klorambucil	Kloramfeni kol	Klorheksidin	Klormadino n acetat	Klotrimazol	Kodergokri nijeve mesila	Kofein	Krizotinib	Krotamiton
AR	AR : -6.6	AR : -6.0	AR : -6.7	AR : -7.3	AR : -5.3	AR : -5.0	AR : 2.8	AR : 12.4	AR : -6.2	AR : -4.5	AR : -6.1
AR an.	AR an.: -7.6	AR an.: -7.4	AR an.: -6.7	AR an.: -7.4	AR an.: -6.0	AR an.: -5.0	AR an.: -2.0	AR an.: 9.7	AR an.: -5.9	AR an.: -5.0	AR an.: -6.8
ER $\alpha$	ER $\alpha$ : -7.7	ER $\alpha$ : -7.7	ER $\alpha$ : -6.6	ER $\alpha$ : -7.0	ER $\alpha$ : -8.3	ER $\alpha$ : -5.8	ER $\alpha$ : -8.2	ER $\alpha$ : -5.2	ER $\alpha$ : -5.7	ER $\alpha$ : -7.1	ER $\alpha$ : -7.1
ER $\alpha$ an.	ER $\alpha$ an.: -8.2	ER $\alpha$ an.: -7.6	ER $\alpha$ an.: -6.7	ER $\alpha$ an.: -6.8	ER $\alpha$ an.: -8.2	ER $\alpha$ an.: -7.9	ER $\alpha$ an.: -7.2	ER $\alpha$ an.: -8.1	ER $\alpha$ an.: -5.4	ER $\alpha$ an.: -8.8	ER $\alpha$ an.: -7.0
ER $\beta$	ER $\beta$ : -7.2	ER $\beta$ : -7.3	ER $\beta$ : -6.8	ER $\beta$ : -7.2	ER $\beta$ : -5.9	ER $\beta$ : -3.5	ER $\beta$ : -3.9	ER $\beta$ : 11.9	ER $\beta$ : -5.9	ER $\beta$ : -5.7	ER $\beta$ : -7.2
ER $\beta$ an.	ER $\beta$ an.: -6.7	ER $\beta$ an.: -8.0	ER $\beta$ an.: -6.2	ER $\beta$ an.: -6.6	ER $\beta$ an.: -7.2	ER $\beta$ an.: -5.7	ER $\beta$ an.: -5.8	ER $\beta$ an.: -7.3	ER $\beta$ an.: -5.8	ER $\beta$ an.: -7.6	ER $\beta$ an.: -7.1
GR	GR: -8.3	GR: -7.3	GR: -7.0	GR: -7.1	GR: -7.9	GR: -9.6	GR: -9.4	GR: -3.5	GR: -5.8	GR: -9.2	GR: -7.0
GR an.	GR an.: -6.8	GR an.: -7.2	GR an.: -5.6	GR an.: -6.3	GR an.: -7.5	GR an.: -8.4	GR an.: -8.1	GR an.: -8.7	GR an.: -5.6	GR an.: -9.5	GR an.: -6.3
LXR $\alpha$	LXR $\alpha$ : -9.0	LXR $\alpha$ : -8.2	LXR $\alpha$ : -7.4	LXR $\alpha$ : -7.8	LXR $\alpha$ : -9.4	LXR $\alpha$ : -7.4	LXR $\alpha$ : -4.8	LXR $\alpha$ : -5.7	LXR $\alpha$ : -6.0	LXR $\alpha$ : -10.5	LXR $\alpha$ : -7.5
LXR $\beta$	LXR $\beta$ : -8.4	LXR $\beta$ : -7.8	LXR $\beta$ : -7.1	LXR $\beta$ : -7.8	LXR $\beta$ : -9.2	LXR $\beta$ : -9.7	LXR $\beta$ : -7.4	LXR $\beta$ : -9.5	LXR $\beta$ : -6.5	LXR $\beta$ : -11.0	LXR $\beta$ : -7.2
PPAR $\alpha$	PPAR $\alpha$ : -6.8	PPAR $\alpha$ : -7.3	PPAR $\alpha$ : -6.8	PPAR $\alpha$ : -6.8	PPAR $\alpha$ : -9.1	PPAR $\alpha$ : -5.5	PPAR $\alpha$ : -8.0	PPAR $\alpha$ : -3.1	PPAR $\alpha$ : -5.8	PPAR $\alpha$ : -8.7	PPAR $\alpha$ : -6.3
PPAR $\beta$	PPAR $\beta$ : -7.7	PPAR $\beta$ : -7.1	PPAR $\beta$ : -7.0	PPAR $\beta$ : -7.0	PPAR $\beta$ : -9.2	PPAR $\beta$ : -6.8	PPAR $\beta$ : -7.1	PPAR $\beta$ : -6.8	PPAR $\beta$ : -6.0	PPAR $\beta$ : -8.9	PPAR $\beta$ : -6.7
PPAR $\gamma$	PPAR $\gamma$ : -6.4	PPAR $\gamma$ : -6.5	PPAR $\gamma$ : -6.1	PPAR $\gamma$ : -7.2	PPAR $\gamma$ : -9.1	PPAR $\gamma$ : -6.6	PPAR $\gamma$ : -7.1	PPAR $\gamma$ : -7.0	PPAR $\gamma$ : -5.7	PPAR $\gamma$ : -8.6	PPAR $\gamma$ : -7.0
RXR $\alpha$	RXR $\alpha$ : -8.1	RXR $\alpha$ : -7.5	RXR $\alpha$ : -7.4	RXR $\alpha$ : -7.9	RXR $\alpha$ : -8.9	RXR $\alpha$ : -7.4	RXR $\alpha$ : -7.1	RXR $\alpha$ : 0.1	RXR $\alpha$ : -5.9	RXR $\alpha$ : -9.0	RXR $\alpha$ : -7.4
TR $\alpha$	TR $\alpha$ : -7.6	TR $\alpha$ : -6.7	TR $\alpha$ : -7.2	TR $\alpha$ : -7.7	TR $\alpha$ : -7.7	TR $\alpha$ : -6.8	TR $\alpha$ : -5.3	TR $\alpha$ : 18.3	TR $\alpha$ : -5.8	TR $\alpha$ : -8.9	TR $\alpha$ : -6.7
TR $\beta$	TR $\beta$ : -7.8	TR $\beta$ : -7.6	TR $\beta$ : -7.3	TR $\beta$ : -7.4	TR $\beta$ : -7.9	TR $\beta$ : -6.1	TR $\beta$ : -4.5	TR $\beta$ : 7.9	TR $\beta$ : -5.9	TR $\beta$ : -8.4	TR $\beta$ : -7.3

Spojina	Kvetiapin	Ksilometazolin	Lacidipin	Lakozamid	Laktobionska kislina	Laktuloza	Lamivudin	Lamotrigin	Lansoprazol	Laropiprant	Latanoprost
AR	AR : -5.3	AR : -6.9	AR : -0.9	AR : -7.0	AR : -5.9	AR : -5.0	AR : -6.7	AR : -7.6	AR : -5.1	AR : -0.5	AR : -4.5
AR an.	AR an.: -5.8	AR an.: -7.5	AR an.: -3.3	AR an.: -7.1	AR an.: -6.1	AR an.: -6.0	AR an.: -6.8	AR an.: -7.8	AR an.: -7.7	AR an.: -6.3	AR an.: -6.6
ER $\alpha$	ER $\alpha$ : -6.5	ER $\alpha$ : -7.4	ER $\alpha$ : -6.6	ER $\alpha$ : -6.9	ER $\alpha$ : -5.8	ER $\alpha$ : -6.7	ER $\alpha$ : -6.2	ER $\alpha$ : -7.4	ER $\alpha$ : -8.3	ER $\alpha$ : -8.0	ER $\alpha$ : -8.5
ER $\alpha$ an.	ER $\alpha$ an.: -7.0	ER $\alpha$ an.: -7.9	ER $\alpha$ an.: -8.0	ER $\alpha$ an.: -6.7	ER $\alpha$ an.: -6.2	ER $\alpha$ an.: -6.3	ER $\alpha$ an.: -6.2	ER $\alpha$ an.: -7.3	ER $\alpha$ an.: -7.9	ER $\alpha$ an.: -7.4	ER $\alpha$ an.: -7.1
ER $\beta$	ER $\beta$ : -4.8	ER $\beta$ : -6.8	ER $\beta$ : -3.6	ER $\beta$ : -7.1	ER $\beta$ : -5.8	ER $\beta$ : -6.3	ER $\beta$ : -6.6	ER $\beta$ : -7.6	ER $\beta$ : -8.5	ER $\beta$ : -4.6	ER $\beta$ : -6.2
ER $\beta$ an.	ER $\beta$ an.: -6.1	ER $\beta$ an.: -7.0	ER $\beta$ an.: -5.9	ER $\beta$ an.: -6.6	ER $\beta$ an.: -5.6	ER $\beta$ an.: -6.1	ER $\beta$ an.: -6.3	ER $\beta$ an.: -7.2	ER $\beta$ an.: -8.1	ER $\beta$ an.: -7.9	ER $\beta$ an.: -7.1
GR	GR: -7.9	GR: -7.8	GR: -8.2	GR: -7.0	GR: -6.5	GR: -7.3	GR: -6.5	GR: -6.9	GR: -9.3	GR: -7.0	GR: -8.4
GR an.	GR an.: -8.0	GR an.: -6.3	GR an.: -7.6	GR an.: -6.1	GR an.: -5.5	GR an.: -6.9	GR an.: -6.1	GR an.: -6.8	GR an.: -7.8	GR an.: -7.5	GR an.: -7.5
LXR $\alpha$	LXR $\alpha$ : -9.1	LXR $\alpha$ : -8.8	LXR $\alpha$ : -5.9	LXR $\alpha$ : -7.0	LXR $\alpha$ : -6.2	LXR $\alpha$ : -7.0	LXR $\alpha$ : -6.4	LXR $\alpha$ : -7.3	LXR $\alpha$ : -9.6	LXR $\alpha$ : -6.9	LXR $\alpha$ : -9.3
LXR $\beta$	LXR $\beta$ : -9.3	LXR $\beta$ : -9.3	LXR $\beta$ : -7.8	LXR $\beta$ : -7.2	LXR $\beta$ : -6.8	LXR $\beta$ : -7.9	LXR $\beta$ : -6.4	LXR $\beta$ : -7.6	LXR $\beta$ : -9.5	LXR $\beta$ : -9.0	LXR $\beta$ : -9.3
PPAR $\alpha$	PPAR $\alpha$ : -7.6	PPAR $\alpha$ : -7.2	PPAR $\alpha$ : -7.2	PPAR $\alpha$ : -7.2	PPAR $\alpha$ : -6.7	PPAR $\alpha$ : -8.0	PPAR $\alpha$ : -6.1	PPAR $\alpha$ : -6.9	PPAR $\alpha$ : -8.3	PPAR $\alpha$ : -7.4	PPAR $\alpha$ : -7.7
PPAR $\beta$	PPAR $\beta$ : -8.2	PPAR $\beta$ : -8.0	PPAR $\beta$ : -6.9	PPAR $\beta$ : -6.9	PPAR $\beta$ : -7.0	PPAR $\beta$ : -7.0	PPAR $\beta$ : -6.3	PPAR $\beta$ : -7.3	PPAR $\beta$ : -9.0	PPAR $\beta$ : -6.4	PPAR $\beta$ : -8.4
PPAR $\gamma$	PPAR $\gamma$ : -8.0	PPAR $\gamma$ : -6.6	PPAR $\gamma$ : -6.7	PPAR $\gamma$ : -7.5	PPAR $\gamma$ : -6.1	PPAR $\gamma$ : -6.4	PPAR $\gamma$ : -5.8	PPAR $\gamma$ : -5.8	PPAR $\gamma$ : -8.8	PPAR $\gamma$ : -7.9	PPAR $\gamma$ : -8.1
RXR $\alpha$	RXR $\alpha$ : -7.4	RXR $\alpha$ : -7.7	RXR $\alpha$ : -8.1	RXR $\alpha$ : -7.3	RXR $\alpha$ : -5.8	RXR $\alpha$ : -6.7	RXR $\alpha$ : -5.8	RXR $\alpha$ : -7.4	RXR $\alpha$ : -9.7	RXR $\alpha$ : -10.2	RXR $\alpha$ : -9.1
TR $\alpha$	TR $\alpha$ : -7.6	TR $\alpha$ : -8.0	TR $\alpha$ : -4.9	TR $\alpha$ : -7.3	TR $\alpha$ : -6.0	TR $\alpha$ : -6.2	TR $\alpha$ : -6.3	TR $\alpha$ : -7.3	TR $\alpha$ : -9.4	TR $\alpha$ : -4.5	TR $\alpha$ : -7.9
TR $\beta$	TR $\beta$ : -8.8	TR $\beta$ : -8.3	TR $\beta$ : -5.6	TR $\beta$ : -7.3	TR $\beta$ : -6.4	TR $\beta$ : -6.8	TR $\beta$ : -6.3	TR $\beta$ : -7.4	TR $\beta$ : -9.5	TR $\beta$ : -3.0	TR $\beta$ : -8.2

Spojina	Leflunomid	Lenalidomid	Lerkanidipin	Letrozol	Levcin	Levetiracetam	Levobupivakain	Levocetirizin	Levodopa	Levofloksacin	Levofolinska kislina
AR	AR : -8.0	AR : -8.0	AR : -0.6	AR : -1.1	AR : -5.2	AR : -6.5	AR : -6.8	AR : -4.1	AR : -6.7	AR : -5.0	AR : -1.3
AR an.	AR an.: -8.0	AR an.: -8.3	AR an.: 0.2	AR an.: -4.7	AR an.: -5.1	AR an.: -6.6	AR an.: -7.2	AR an.: -5.6	AR an.: -6.7	AR an.: -5.0	AR an.: -3.4
ER $\alpha$	ER $\alpha$ : -8.3	ER $\alpha$ : -8.3	ER $\alpha$ : -8.7	ER $\alpha$ : -8.0	ER $\alpha$ : -4.7	ER $\alpha$ : -5.8	ER $\alpha$ : -7.7	ER $\alpha$ : -7.7	ER $\alpha$ : -6.1	ER $\alpha$ : -4.5	ER $\alpha$ : -7.2
ER $\alpha$ an.	ER $\alpha$ an.: -8.1	ER $\alpha$ an.: -8.7	ER $\alpha$ an.: -9.2	ER $\alpha$ an.: -7.9	ER $\alpha$ an.: -4.8	ER $\alpha$ an.: -5.5	ER $\alpha$ an.: -8.1	ER $\alpha$ an.: -7.7	ER $\alpha$ an.: -6.3	ER $\alpha$ an.: -6.2	ER $\alpha$ an.: -8.6
ER $\beta$	ER $\beta$ : -7.9	ER $\beta$ : -8.3	ER $\beta$ : -0.9	ER $\beta$ : -5.7	ER $\beta$ : -4.6	ER $\beta$ : -5.5	ER $\beta$ : -8.0	ER $\beta$ : -6.9	ER $\beta$ : -6.4	ER $\beta$ : -3.0	ER $\beta$ : -3.9
ER $\beta$ an.	ER $\beta$ an.: -7.9	ER $\beta$ an.: -7.8	ER $\beta$ an.: -8.4	ER $\beta$ an.: -7.9	ER $\beta$ an.: -4.4	ER $\beta$ an.: -5.4	ER $\beta$ an.: -8.0	ER $\beta$ an.: -7.3	ER $\beta$ an.: -6.1	ER $\beta$ an.: -5.4	ER $\beta$ an.: -7.7
GR	GR: -7.6	GR: -8.2	GR: -6.8	GR: -7.1	GR: -5.1	GR: -5.4	GR: -7.6	GR: -8.3	GR: -6.8	GR: -8.8	GR: -9.2
GR an.	GR an.: -7.1	GR an.: -8.0	GR an.: -9.2	GR an.: -7.3	GR an.: -4.5	GR an.: -5.3	GR an.: -7.7	GR an.: -7.4	GR an.: -5.9	GR an.: -7.5	GR an.: -8.7
LXR $\alpha$	LXR $\alpha$ : -8.6	LXR $\alpha$ : -8.8	LXR $\alpha$ : -9.3	LXR $\alpha$ : -9.3	LXR $\alpha$ : -4.8	LXR $\alpha$ : -5.9	LXR $\alpha$ : -8.6	LXR $\alpha$ : -9.1	LXR $\alpha$ : -6.5	LXR $\alpha$ : -8.4	LXR $\alpha$ : -9.6

LXR β	LXR β: -8.5	LXR β: -8.7	LXR β: -9.3	LXR β: -8.4	LXR β: -4.8	LXR β: -6.1	LXR β: -7.7	LXR β: -8.4	LXR β: -6.8	LXR β: -9.3	LXR β: -9.5
PPAR α	PPAR α: -7.5	PPAR α: -8.6	PPAR α: -9.1	PPAR α: -7.8	PPAR α: -4.3	PPAR α: -5.3	PPAR α: -7.3	PPAR α: -7.3	PPAR α: -6.2	PPAR α: -5.3	PPAR α: -8.8
PPAR β	PPAR β: -8.1	PPAR β: -7.7	PPAR β: -8.7	PPAR β: -8.0	PPAR β: -4.6	PPAR β: -5.9	PPAR β: -7.5	PPAR β: -7.7	PPAR β: -6.4	PPAR β: -7.4	PPAR β: -8.5
PPAR γ	PPAR γ: -7.6	PPAR γ: -7.9	PPAR γ: -8.5	PPAR γ: -8.0	PPAR γ: -4.6	PPAR γ: -5.4	PPAR γ: -7.0	PPAR γ: -8.0	PPAR γ: -6.3	PPAR γ: -7.4	PPAR γ: -8.5
RXR α	RXR α: -8.3	RXR α: -8.3	RXR α: -5.9	RXR α: -8.5	RXR α: -5.0	RXR α: -5.5	RXR α: -8.5	RXR α: -7.7	RXR α: -6.7	RXR α: -8.5	RXR α: -6.7
TR α	TR α: -8.8	TR α: -7.5	TR α: -4.1	TR α: -5.1	TR α: -4.9	TR α: -6.0	TR α: -6.8	TR α: -7.3	TR α: -6.5	TR α: -8.4	TR α: -6.2
TR β	TR β: -8.7	TR β: -8.4	TR β: -1.8	TR β: -6.4	TR β: -4.9	TR β: -5.7	TR β: -7.8	TR β: -8.3	TR β: -6.7	TR β: -8.1	TR β: -5.7

Spojina	Levomentol	Levomepro mazin	Lidokain	Linagliptin	Linezolid	Linkomicin	Lipegfilgras tim	Lizin	Lizinopril	Lodoksamid	Loksapin
AR	AR : -6.2	AR : -4.9	AR : -7.0	AR : 13.3	AR : -6.9	AR : -4.8	AR : 2.5	AR : -4.9	AR : -5.7	AR : -5.6	AR : -1.8
AR an.	AR an.: -6.2	AR an.: -7.2	AR an.: -6.8	AR an.: 7.5	AR an.: -5.8	AR an.: -5.0	AR an.: 3.4	AR an.: -4.7	AR an.: -6.2	AR an.: -6.3	AR an.: -7.0
ER α	ER α: -5.8	ER α: -7.8	ER α: -7.0	ER α: -5.7	ER α: -6.7	ER α: -6.8	ER α: -5.2	ER α: -4.5	ER α: -7.7	ER α: -7.0	ER α: -8.6
ER α an.	ER α an.: -5.9	ER α an.: -6.0	ER α an.: -6.8	ER α an.: -7.1	ER α an.: -7.8	ER α an.: -5.7	ER α an.: -6.7	ER α an.: -4.3	ER α an.: -7.6	ER α an.: -7.1	ER α an.: -8.5
ER β	ER β: -6.1	ER β: -6.7	ER β: -6.9	ER β: 9.8	ER β: -6.2	ER β: -5.4	ER β: 1.4	ER β: -4.3	ER β: -6.3	ER β: -6.5	ER β: -7.8
ER β an.	ER β an.: -6.0	ER β an.: -7.6	ER β an.: -7.0	ER β an.: -7.2	ER β an.: -7.4	ER β an.: -6.5	ER β an.: -6.2	ER β an.: -4.8	ER β an.: -8.3	ER β an.: -6.6	ER β an.: -8.5
GR	GR: -5.5	GR: -7.5	GR: -6.5	GR: -8.8	GR: -8.7	GR: -8.0	GR: -7.0	GR: -5.1	GR: -8.0	GR: -7.6	GR: -7.0
GR an.	GR an.: -5.7	GR an.: -7.3	GR an.: -6.3	GR an.: -9.2	GR an.: -7.6	GR an.: -6.8	GR an.: -7.5	GR an.: -4.7	GR an.: -7.2	GR an.: -6.3	GR an.: -8.7
LXR α	LXR α: -6.5	LXR α: -7.8	LXR α: -7.0	LXR α: -8.9	LXR α: -9.4	LXR α: -7.6	LXR α: -7.1	LXR α: -4.5	LXR α: -8.6	LXR α: -7.9	LXR α: -10.2
LXR β	LXR β: -6.2	LXR β: -7.9	LXR β: -7.6	LXR β: -11.1	LXR β: -9.0	LXR β: -8.4	LXR β: -6.7	LXR β: -4.5	LXR β: -8.4	LXR β: -7.3	LXR β: -8.5
PPAR α	PPAR α: -5.4	PPAR α: -7.8	PPAR α: -6.6	PPAR α: -7.0	PPAR α: -7.6	PPAR α: -7.0	PPAR α: -6.8	PPAR α: -4.4	PPAR α: -7.5	PPAR α: -7.3	PPAR α: -7.2
PPAR β	PPAR β: -5.7	PPAR β: -7.3	PPAR β: -6.5	PPAR β: -7.7	PPAR β: -7.6	PPAR β: -7.4	PPAR β: -6.0	PPAR β: -4.9	PPAR β: -9.0	PPAR β: -7.1	PPAR β: -7.3
PPAR γ	PPAR γ: -5.6	PPAR γ: -7.4	PPAR γ: -6.5	PPAR γ: -8.7	PPAR γ: -7.7	PPAR γ: -7.0	PPAR γ: -7.5	PPAR γ: -5.0	PPAR γ: -7.9	PPAR γ: -6.3	PPAR γ: -8.5
RXR α	RXR α: -6.5	RXR α: -7.8	RXR α: -6.9	RXR α: -8.7	RXR α: -8.6	RXR α: -7.1	RXR α: -3.7	RXR α: -5.1	RXR α: -9.1	RXR α: -6.9	RXR α: -9.3
TR α	TR α: -6.0	TR α: -5.2	TR α: -7.0	TR α: -6.2	TR α: -8.3	TR α: -6.2	TR α: 3.8	TR α: -4.9	TR α: -7.3	TR α: -5.8	TR α: -5.1
TR β	TR β: -6.4	TR β: -6.0	TR β: -7.1	TR β: -6.4	TR β: -9.3	TR β: -6.7	TR β: -2.0	TR β: -4.9	TR β: -8.2	TR β: -7.1	TR β: -5.9

Spojina	Loperamid	Loratadin	Lornoksika m	Losartan	Lovastatin	Macitentan	Mangafodip ir	Manitol	Medazepam	Medoksomil olmesartana t	Medroksipr ogesteron acetat
AR	AR : 4.8	AR : 4.7	AR : -4.7	AR : -1.6	AR : -4.3	AR : -2.4	AR : 0.9	AR : -5.0	AR : -4.8	AR : 5.5	AR : -3.9
AR an.	AR an.: 3.3	AR an.: -1.9	AR an.: -7.5	AR an.: -3.3	AR an.: -5.8	AR an.: -3.5	AR an.: 0.6	AR an.: -4.8	AR an.: -7.3	AR an.: 2.3	AR an.: -3.5
ER α	ER α: -7.9	ER α: -7.3	ER α: -7.1	ER α: -5.8	ER α: -8.0	ER α: -8.7	ER α: -5.6	ER α: -4.8	ER α: -9.2	ER α: -5.9	ER α: -4.5
ER α an.	ER α an.: -8.1	ER α an.: -8.1	ER α an.: -6.7	ER α an.: -8.9	ER α an.: -7.4	ER α an.: -6.9	ER α an.: -6.9	ER α an.: -4.6	ER α an.: -8.3	ER α an.: -9.1	ER α an.: -7.1
ER β	ER β: 0.1	ER β: -1.0	ER β: -6.2	ER β: -2.2	ER β: -7.2	ER β: -3.5	ER β: -0.5	ER β: -4.6	ER β: -8.4	ER β: 3.3	ER β: -3.9
ER β an.	ER β an.: -8.0	ER β an.: -9.2	ER β an.: -7.0	ER β an.: -8.7	ER β an.: -7.8	ER β an.: -7.2	ER β an.: -6.9	ER β an.: -4.4	ER β an.: -8.6	ER β an.: -8.1	ER β an.: -6.2
GR	GR: -9.5	GR: -5.9	GR: -8.9	GR: -9.1	GR: -9.0	GR: -7.4	GR: -7.4	GR: -4.8	GR: -8.0	GR: -7.7	GR: -8.9
GR an.	GR an.: -9.8	GR an.: -9.9	GR an.: -7.7	GR an.: -8.6	GR an.: -8.2	GR an.: -7.9	GR an.: -7.3	GR an.: -4.5	GR an.: -8.0	GR an.: -8.6	GR an.: -8.2
LXR α	LXR α: -8.7	LXR α: -8.7	LXR α: -9.0	LXR α: -9.3	LXR α: -9.6	LXR α: -7.5	LXR α: -7.9	LXR α: -5.2	LXR α: -8.7	LXR α: -9.3	LXR α: -10.1
LXR β	LXR β: -10.2	LXR β: -10.0	LXR β: -9.2	LXR β: -10.6	LXR β: -9.7	LXR β: -9.2	LXR β: -7.4	LXR β: -4.6	LXR β: -8.4	LXR β: -9.8	LXR β: -10.6
PPAR α	PPAR α: -7.6	PPAR α: -7.7	PPAR α: -7.1	PPAR α: -8.2	PPAR α: -8.4	PPAR α: -8.7	PPAR α: -8.0	PPAR α: -5.0	PPAR α: -8.4	PPAR α: -9.1	PPAR α: -4.1
PPAR β	PPAR β: -8.0	PPAR β: -7.1	PPAR β: -8.1	PPAR β: -9.7	PPAR β: -7.2	PPAR β: -7.6	PPAR β: -7.5	PPAR β: -5.4	PPAR β: -7.6	PPAR β: -10.3	PPAR β: -6.7
PPAR γ	PPAR γ: -8.3	PPAR γ: -8.3	PPAR γ: -7.6	PPAR γ: -9.8	PPAR γ: -8.0	PPAR γ: -8.3	PPAR γ: -8.2	PPAR γ: -4.6	PPAR γ: -7.7	PPAR γ: -9.6	PPAR γ: -6.3
RXR α	RXR α: -6.3	RXR α: -8.7	RXR α: -8.3	RXR α: -8.4	RXR α: -10.3	RXR α: -8.0	RXR α: -6.3	RXR α: -5.4	RXR α: -8.2	RXR α: -6.5	RXR α: -7.0
TR α	TR α: -5.8	TR α: 0.7	TR α: -6.5	TR α: -5.2	TR α: -6.3	TR α: -5.1	TR α: -0.3	TR α: -5.3	TR α: -7.2	TR α: -1.2	TR α: -0.4
TR β	TR β: -7.9	TR β: -1.8	TR β: -7.7	TR β: -8.0	TR β: -8.2	TR β: -5.1	TR β: -4.2	TR β: -5.2	TR β: -7.4	TR β: -3.6	TR β: -5.7

Spojina	Megestrolacetat	Melatonin	Melfalan	Meloksikam	Memantin	Menton	Mepivakain	Merkaptamin	Merkaptopurin	Meropenem	Mesalazin
AR	AR : -6.9	AR : -7.1	AR : -6.2	AR : -7.7	AR : -6.8	AR : -6.2	AR : -7.9	AR : -2.5	AR : -5.3	AR : -3.1	AR : -5.7
AR an.	AR an.: -7.2	AR an.: -7.0	AR an.: -6.4	AR an.: -8.5	AR an.: -7.1	AR an.: -6.6	AR an.: -7.8	AR an.: -2.9	AR an.: -5.1	AR an.: -5.9	AR an.: -5.7
ER $\alpha$	ER $\alpha$ : -4.5	ER $\alpha$ : -7.1	ER $\alpha$ : -6.8	ER $\alpha$ : -7.6	ER $\alpha$ : -7.2	ER $\alpha$ : -6.0	ER $\alpha$ : -8.3	ER $\alpha$ : -2.8	ER $\alpha$ : -5.5	ER $\alpha$ : -6.5	ER $\alpha$ : -5.9
ER $\alpha$ an.	ER $\alpha$ an.: -7.2	ER $\alpha$ an.: -6.9	ER $\alpha$ an.: -6.6	ER $\alpha$ an.: -7.5	ER $\alpha$ an.: -6.7	ER $\alpha$ an.: -6.0	ER $\alpha$ an.: -8.1	ER $\alpha$ an.: -2.7	ER $\alpha$ an.: -4.9	ER $\alpha$ an.: -5.8	ER $\alpha$ an.: -5.8
ER $\beta$	ER $\beta$ : -2.6	ER $\beta$ : -7.1	ER $\beta$ : -6.4	ER $\beta$ : -7.7	ER $\beta$ : -6.7	ER $\beta$ : -6.4	ER $\beta$ : -7.6	ER $\beta$ : -2.4	ER $\beta$ : -5.2	ER $\beta$ : -5.7	ER $\beta$ : -5.8
ER $\beta$ an.	ER $\beta$ an.: -5.9	ER $\beta$ an.: -6.7	ER $\beta$ an.: -6.2	ER $\beta$ an.: -6.5	ER $\beta$ an.: -6.7	ER $\beta$ an.: -6.0	ER $\beta$ an.: -8.3	ER $\beta$ an.: -2.7	ER $\beta$ an.: -5.2	ER $\beta$ an.: -5.9	ER $\beta$ an.: -5.6
GR	GR: -9.0	GR: -7.4	GR: -7.1	GR: -9.5	GR: -6.1	GR: -5.8	GR: -7.5	GR: -2.5	GR: -5.1	GR: -8.1	GR: -5.5
GR an.	GR an.: -8.0	GR an.: -6.3	GR an.: -5.7	GR an.: -8.2	GR an.: -5.7	GR an.: -5.8	GR an.: -7.6	GR an.: -2.6	GR an.: -5.1	GR an.: -7.0	GR an.: -5.5
LXR $\alpha$	LXR $\alpha$ : -8.3	LXR $\alpha$ : -7.7	LXR $\alpha$ : -7.0	LXR $\alpha$ : -8.2	LXR $\alpha$ : -7.3	LXR $\alpha$ : -6.5	LXR $\alpha$ : -8.7	LXR $\alpha$ : -2.5	LXR $\alpha$ : -5.4	LXR $\alpha$ : -8.8	LXR $\alpha$ : -5.7
LXR $\beta$	LXR $\beta$ : -11.9	LXR $\beta$ : -8.0	LXR $\beta$ : -7.2	LXR $\beta$ : -9.6	LXR $\beta$ : -7.7	LXR $\beta$ : -6.4	LXR $\beta$ : -8.2	LXR $\beta$ : -2.5	LXR $\beta$ : -5.2	LXR $\beta$ : -8.7	LXR $\beta$ : -6.0
PPAR $\alpha$	PPAR $\alpha$ : -3.9	PPAR $\alpha$ : -7.0	PPAR $\alpha$ : -6.1	PPAR $\alpha$ : -6.3	PPAR $\alpha$ : -6.8	PPAR $\alpha$ : -5.6	PPAR $\alpha$ : -7.5	PPAR $\alpha$ : -2.6	PPAR $\alpha$ : -5.1	PPAR $\alpha$ : -7.4	PPAR $\alpha$ : -5.5
PPAR $\beta$	PPAR $\beta$ : -8.1	PPAR $\beta$ : -7.3	PPAR $\beta$ : -6.7	PPAR $\beta$ : -7.9	PPAR $\beta$ : -6.3	PPAR $\beta$ : -5.8	PPAR $\beta$ : -7.7	PPAR $\beta$ : -2.7	PPAR $\beta$ : -5.2	PPAR $\beta$ : -8.1	PPAR $\beta$ : -5.7
PPAR $\gamma$	PPAR $\gamma$ : -6.2	PPAR $\gamma$ : -7.3	PPAR $\gamma$ : -6.3	PPAR $\gamma$ : -7.1	PPAR $\gamma$ : -5.3	PPAR $\gamma$ : -5.8	PPAR $\gamma$ : -6.5	PPAR $\gamma$ : -2.6	PPAR $\gamma$ : -5.0	PPAR $\gamma$ : -6.5	PPAR $\gamma$ : -5.6
RXR $\alpha$	RXR $\alpha$ : -6.4	RXR $\alpha$ : -8.1	RXR $\alpha$ : -7.0	RXR $\alpha$ : -7.8	RXR $\alpha$ : -6.8	RXR $\alpha$ : -6.3	RXR $\alpha$ : -8.2	RXR $\alpha$ : -2.4	RXR $\alpha$ : -5.3	RXR $\alpha$ : -7.8	RXR $\alpha$ : -6.2
TR $\alpha$	TR $\alpha$ : -4.8	TR $\alpha$ : -7.9	TR $\alpha$ : -7.1	TR $\alpha$ : -4.6	TR $\alpha$ : -6.6	TR $\alpha$ : -6.3	TR $\alpha$ : -7.9	TR $\alpha$ : -3.0	TR $\alpha$ : -5.2	TR $\alpha$ : -6.1	TR $\alpha$ : -6.1
TR $\beta$	TR $\beta$ : -8.4	TR $\beta$ : -7.5	TR $\beta$ : -6.9	TR $\beta$ : -7.7	TR $\beta$ : -7.1	TR $\beta$ : -6.5	TR $\beta$ : -8.9	TR $\beta$ : -3.0	TR $\beta$ : -5.7	TR $\beta$ : -7.5	TR $\beta$ : -5.5

Spojina	Metadon	Metformin	Metildigoksin	Metilfenidat	Metilfenobarbital	Metilnaltrexon	Metilprednizolonaceponat	Metilprednizolonacetat	Metiltioninijev klorid	Metionin	Metoklopramid
AR	AR : -3.8	AR : -4.9	AR : 22.6	AR : -6.9	AR : -7.6	AR : -4.5	AR : -0.8	AR : -4.8	AR : -5.6	AR : -4.5	AR : -6.3
AR an.	AR an.: -6.3	AR an.: -5.1	AR an.: 20.4	AR an.: -7.2	AR an.: -7.7	AR an.: -7.6	AR an.: -1.5	AR an.: -6.0	AR an.: -5.9	AR an.: -4.4	AR an.: -6.2
ER $\alpha$	ER $\alpha$ : -8.2	ER $\alpha$ : -5.2	ER $\alpha$ : -7.2	ER $\alpha$ : -7.4	ER $\alpha$ : -8.2	ER $\alpha$ : -7.8	ER $\alpha$ : -4.5	ER $\alpha$ : -4.9	ER $\alpha$ : -5.6	ER $\alpha$ : -3.9	ER $\alpha$ : -6.6
ER $\alpha$ an.	ER $\alpha$ an.: -8.3	ER $\alpha$ an.: -4.9	ER $\alpha$ an.: -8.2	ER $\alpha$ an.: -7.2	ER $\alpha$ an.: -7.9	ER $\alpha$ an.: -7.3	ER $\alpha$ an.: -7.0	ER $\alpha$ an.: -7.1	ER $\alpha$ an.: -6.7	ER $\alpha$ an.: -4.1	ER $\alpha$ an.: -6.6
ER $\beta$	ER $\beta$ : -7.7	ER $\beta$ : -4.9	ER $\beta$ : 18.2	ER $\beta$ : -7.7	ER $\beta$ : -7.9	ER $\beta$ : -5.8	ER $\beta$ : -1.3	ER $\beta$ : -3.5	ER $\beta$ : -4.9	ER $\beta$ : -4.1	ER $\beta$ : -6.4
ER $\beta$ an.	ER $\beta$ an.: -8.1	ER $\beta$ an.: -4.8	ER $\beta$ an.: -8.3	ER $\beta$ an.: -7.4	ER $\beta$ an.: -7.4	ER $\beta$ an.: -7.5	ER $\beta$ an.: -5.4	ER $\beta$ an.: -5.7	ER $\beta$ an.: -6.8	ER $\beta$ an.: -3.8	ER $\beta$ an.: -6.1
GR	GR: -8.4	GR: -4.9	GR: -1.4	GR: -7.3	GR: -7.4	GR: -8.2	GR: -8.6	GR: -8.9	GR: -8.2	GR: -4.4	GR: -6.7
GR an.	GR an.: -7.6	GR an.: -5.3	GR an.: -9.3	GR an.: -6.6	GR an.: -6.8	GR an.: -8.8	GR an.: -6.9	GR an.: -8.6	GR an.: -6.9	GR an.: -4.0	GR an.: -6.9
LXR $\alpha$	LXR $\alpha$ : -7.5	LXR $\alpha$ : -4.8	LXR $\alpha$ : -8.5	LXR $\alpha$ : -7.7	LXR $\alpha$ : -8.3	LXR $\alpha$ : -9.8	LXR $\alpha$ : -8.4	LXR $\alpha$ : -7.3	LXR $\alpha$ : -8.6	LXR $\alpha$ : -4.1	LXR $\alpha$ : -7.1
LXR $\beta$	LXR $\beta$ : -8.0	LXR $\beta$ : -4.8	LXR $\beta$ : 0.3	LXR $\beta$ : -7.9	LXR $\beta$ : -8.4	LXR $\beta$ : -9.9	LXR $\beta$ : -7.9	LXR $\beta$ : -8.2	LXR $\beta$ : -9.0	LXR $\beta$ : -4.3	LXR $\beta$ : -7.1
PPAR $\alpha$	PPAR $\alpha$ : -7.6	PPAR $\alpha$ : -5.1	PPAR $\alpha$ : -4.1	PPAR $\alpha$ : -7.1	PPAR $\alpha$ : -7.5	PPAR $\alpha$ : -6.3	PPAR $\alpha$ : -2.6	PPAR $\alpha$ : -7.0	PPAR $\alpha$ : -6.6	PPAR $\alpha$ : -4.0	PPAR $\alpha$ : -6.6
PPAR $\beta$	PPAR $\beta$ : -7.1	PPAR $\beta$ : -4.9	PPAR $\beta$ : -8.1	PPAR $\beta$ : -7.2	PPAR $\beta$ : -6.9	PPAR $\beta$ : -6.0	PPAR $\beta$ : -6.6	PPAR $\beta$ : -6.9	PPAR $\beta$ : -7.8	PPAR $\beta$ : -4.2	PPAR $\beta$ : -6.8
PPAR $\gamma$	PPAR $\gamma$ : -6.1	PPAR $\gamma$ : -4.6	PPAR $\gamma$ : -8.1	PPAR $\gamma$ : -7.3	PPAR $\gamma$ : -7.4	PPAR $\gamma$ : -6.1	PPAR $\gamma$ : -6.8	PPAR $\gamma$ : -6.8	PPAR $\gamma$ : -7.6	PPAR $\gamma$ : -3.9	PPAR $\gamma$ : -6.9
RXR $\alpha$	RXR $\alpha$ : -8.3	RXR $\alpha$ : -4.4	RXR $\alpha$ : 1.0	RXR $\alpha$ : -7.3	RXR $\alpha$ : -8.4	RXR $\alpha$ : -7.9	RXR $\alpha$ : -8.5	RXR $\alpha$ : -7.4	RXR $\alpha$ : -6.8	RXR $\alpha$ : -4.4	RXR $\alpha$ : -6.9
TR $\alpha$	TR $\alpha$ : -7.4	TR $\alpha$ : -5.0	TR $\alpha$ : 22.0	TR $\alpha$ : -7.8	TR $\alpha$ : -7.2	TR $\alpha$ : -4.7	TR $\alpha$ : -1.9	TR $\alpha$ : -2.1	TR $\alpha$ : -7.7	TR $\alpha$ : -4.4	TR $\alpha$ : -6.5
TR $\beta$	TR $\beta$ : -8.1	TR $\beta$ : -5.3	TR $\beta$ : 12.8	TR $\beta$ : -7.9	TR $\beta$ : -8.2	TR $\beta$ : -8.6	TR $\beta$ : -6.1	TR $\beta$ : -4.9	TR $\beta$ : -8.0	TR $\beta$ : -4.3	TR $\beta$ : -7.1

Spojina	Metoprolol	Metotreksat	Metronidazole	Midazolam	Miglustat	Mikofenolna kislina	Mikonazol	Minoksidil	Mirabegron	Mirtazapine	Mitoksantrom
AR	AR : -6.2	AR : -2.4	AR : -5.3	AR : -4.0	AR : -6.0	AR : -7.6	AR : -6.0	AR : -6.8	AR : -6.7	AR : -7.8	AR : -1.8
AR an.	AR an.: -6.7	AR an.: -4.2	AR an.: -4.9	AR an.: -7.7	AR an.: -5.8	AR an.: -7.2	AR an.: -7.1	AR an.: -7.1	AR an.: -7.3	AR an.: -8.2	AR an.: -3.8
ER $\alpha$	ER $\alpha$ : -6.3	ER $\alpha$ : -7.2	ER $\alpha$ : -4.9	ER $\alpha$ : -8.7	ER $\alpha$ : -5.5	ER $\alpha$ : -7.3	ER $\alpha$ : -8.7	ER $\alpha$ : -7.1	ER $\alpha$ : -8.7	ER $\alpha$ : -7.1	ER $\alpha$ : -7.1
ER $\alpha$ an.	ER $\alpha$ an.: -6.2	ER $\alpha$ an.: -8.2	ER $\alpha$ an.: -5.3	ER $\alpha$ an.: -8.0	ER $\alpha$ an.: -6.0	ER $\alpha$ an.: -7.4	ER $\alpha$ an.: -8.0	ER $\alpha$ an.: -6.6	ER $\alpha$ an.: -8.5	ER $\alpha$ an.: -7.8	ER $\alpha$ an.: -6.3
ER $\beta$	ER $\beta$ : -6.6	ER $\beta$ : -3.2	ER $\beta$ : -5.0	ER $\beta$ : -8.7	ER $\beta$ : -5.6	ER $\beta$ : -7.9	ER $\beta$ : -6.9	ER $\beta$ : -6.8	ER $\beta$ : -6.7	ER $\beta$ : -9.0	ER $\beta$ : -3.8
ER $\beta$ an.	ER $\beta$ an.: -5.9	ER $\beta$ an.: -7.9	ER $\beta$ an.: -5.0	ER $\beta$ an.: -8.7	ER $\beta$ an.: -5.8	ER $\beta$ an.: -7.1	ER $\beta$ an.: -8.3	ER $\beta$ an.: -6.7	ER $\beta$ an.: -8.5	ER $\beta$ an.: -7.9	ER $\beta$ an.: -6.6

GR	GR: -6.6	GR: -9.2	GR: -5.4	GR: -8.4	GR: -5.7	GR: -7.9	GR: -8.2	GR: -6.6	GR: -9.2	GR: -8.2	GR: -6.4
GR an.	GR an.: -5.8	GR an.: -8.2	GR an.: -4.8	GR an.: -9.3	GR an.: -5.2	GR an.: -7.4	GR an.: -7.9	GR an.: -6.3	GR an.: -7.1	GR an.: -7.9	GR an.: -7.1
LXR $\alpha$	LXR $\alpha$ : -7.0	LXR $\alpha$ : -9.2	LXR $\alpha$ : -5.1	LXR $\alpha$ : -9.1	LXR $\alpha$ : -6.1	LXR $\alpha$ : -8.6	LXR $\alpha$ : -9.8	LXR $\alpha$ : -7.0	LXR $\alpha$ : -8.7	LXR $\alpha$ : -9.3	LXR $\alpha$ : -6.6
LXR $\beta$	LXR $\beta$ : -6.9	LXR $\beta$ : -9.8	LXR $\beta$ : -5.3	LXR $\beta$ : -7.8	LXR $\beta$ : -6.4	LXR $\beta$ : -8.5	LXR $\beta$ : -9.5	LXR $\beta$ : -7.3	LXR $\beta$ : -9.1	LXR $\beta$ : -9.2	LXR $\beta$ : -7.0
PPAR $\alpha$	PPAR $\alpha$ : -6.7	PPAR $\alpha$ : -7.8	PPAR $\alpha$ : -5.0	PPAR $\alpha$ : -7.4	PPAR $\alpha$ : -6.1	PPAR $\alpha$ : -7.1	PPAR $\alpha$ : -8.3	PPAR $\alpha$ : -6.7	PPAR $\alpha$ : -9.2	PPAR $\alpha$ : -7.8	PPAR $\alpha$ : -7.7
PPAR $\beta$	PPAR $\beta$ : -6.8	PPAR $\beta$ : -8.6	PPAR $\beta$ : -5.4	PPAR $\beta$ : -8.9	PPAR $\beta$ : -5.9	PPAR $\beta$ : -7.5	PPAR $\beta$ : -8.9	PPAR $\beta$ : -6.8	PPAR $\beta$ : -9.2	PPAR $\beta$ : -7.7	PPAR $\beta$ : -8.1
PPAR $\gamma$	PPAR $\gamma$ : -6.2	PPAR $\gamma$ : -8.4	PPAR $\gamma$ : -4.6	PPAR $\gamma$ : -7.8	PPAR $\gamma$ : -5.9	PPAR $\gamma$ : -7.7	PPAR $\gamma$ : -8.7	PPAR $\gamma$ : -6.7	PPAR $\gamma$ : -9.0	PPAR $\gamma$ : -8.4	PPAR $\gamma$ : -7.1
RXR $\alpha$	RXR $\alpha$ : -7.1	RXR $\alpha$ : -8.5	RXR $\alpha$ : -4.9	RXR $\alpha$ : -9.9	RXR $\alpha$ : -5.9	RXR $\alpha$ : -8.4	RXR $\alpha$ : -9.5	RXR $\alpha$ : -7.0	RXR $\alpha$ : -9.0	RXR $\alpha$ : -8.8	RXR $\alpha$ : -7.1
TR $\alpha$	TR $\alpha$ : -7.3	TR $\alpha$ : -8.0	TR $\alpha$ : -4.8	TR $\alpha$ : -7.5	TR $\alpha$ : -6.1	TR $\alpha$ : -8.3	TR $\alpha$ : -7.2	TR $\alpha$ : -7.3	TR $\alpha$ : -7.9	TR $\alpha$ : -9.3	TR $\alpha$ : -2.3
TR $\beta$	TR $\beta$ : -6.6	TR $\beta$ : -8.3	TR $\beta$ : -4.9	TR $\beta$ : -6.3	TR $\beta$ : -6.0	TR $\beta$ : -8.3	TR $\beta$ : -8.6	TR $\beta$ : -7.4	TR $\beta$ : -8.3	TR $\beta$ : -8.6	TR $\beta$ : -3.7

Spojina	Mitotan	Mizoprostol	Mlečna kislina	Modafinil	Mofetilmikofenolat	Moklobemid	Moksifloksacin	Moksonidin	Mupirocin	N(2)-L-alanil-L-glutamin	Nafazolin
AR	AR : -7.7	AR : -5.9	AR : -4.0	AR : -6.6	AR : -4.6	AR : -6.6	AR : 0.3	AR : -6.9	AR : -4.6	AR : -6.1	AR : -7.9
AR an.	AR an.: -8.0	AR an.: -6.2	AR an.: -3.8	AR an.: -7.7	AR an.: -5.7	AR an.: -6.8	AR an.: -1.8	AR an.: -6.8	AR an.: -3.8	AR an.: -5.9	AR an.: -8.2
ER $\alpha$	ER $\alpha$ : -8.5	ER $\alpha$ : -7.3	ER $\alpha$ : -3.7	ER $\alpha$ : -8.5	ER $\alpha$ : -8.0	ER $\alpha$ : -6.9	ER $\alpha$ : -4.3	ER $\alpha$ : -6.0	ER $\alpha$ : -7.5	ER $\alpha$ : -5.6	ER $\alpha$ : -7.9
ER $\alpha$ an.	ER $\alpha$ an.: -8.5	ER $\alpha$ an.: -7.4	ER $\alpha$ an.: -3.4	ER $\alpha$ an.: -7.8	ER $\alpha$ an.: -7.5	ER $\alpha$ an.: -6.8	ER $\alpha$ an.: -6.5	ER $\alpha$ an.: -6.2	ER $\alpha$ an.: -7.4	ER $\alpha$ an.: -5.6	ER $\alpha$ an.: -8.2
ER $\beta$	ER $\beta$ : -8.2	ER $\beta$ : -6.6	ER $\beta$ : -3.7	ER $\beta$ : -8.1	ER $\beta$ : -7.1	ER $\beta$ : -7.1	ER $\beta$ : 1.8	ER $\beta$ : -6.3	ER $\beta$ : -6.2	ER $\beta$ : -5.7	ER $\beta$ : -8.2
ER $\beta$ an.	ER $\beta$ an.: -8.6	ER $\beta$ an.: -6.8	ER $\beta$ an.: -3.3	ER $\beta$ an.: -7.7	ER $\beta$ an.: -7.1	ER $\beta$ an.: -7.0	ER $\beta$ an.: -7.0	ER $\beta$ an.: -6.0	ER $\beta$ an.: -7.1	ER $\beta$ an.: -5.6	ER $\beta$ an.: -7.9
GR	GR: -7.8	GR: -7.6	GR: -4.1	GR: -7.6	GR: -8.9	GR: -7.0	GR: -8.8	GR: -6.6	GR: -7.4	GR: -5.7	GR: -8.2
GR an.	GR an.: -7.4	GR an.: -6.4	GR an.: -3.5	GR an.: -7.0	GR an.: -7.9	GR an.: -6.6	GR an.: -8.3	GR an.: -6.0	GR an.: -7.4	GR an.: -5.4	GR an.: -7.4
LXR $\alpha$	LXR $\alpha$ : -8.9	LXR $\alpha$ : -8.1	LXR $\alpha$ : -3.6	LXR $\alpha$ : -8.3	LXR $\alpha$ : -9.3	LXR $\alpha$ : -7.6	LXR $\alpha$ : -9.6	LXR $\alpha$ : -6.9	LXR $\alpha$ : -7.9	LXR $\alpha$ : -5.6	LXR $\alpha$ : -8.5
LXR $\beta$	LXR $\beta$ : -8.3	LXR $\beta$ : -7.7	LXR $\beta$ : -3.6	LXR $\beta$ : -8.2	LXR $\beta$ : -9.4	LXR $\beta$ : -7.4	LXR $\beta$ : -9.4	LXR $\beta$ : -7.0	LXR $\beta$ : -8.2	LXR $\beta$ : -5.8	LXR $\beta$ : -8.9
PPAR $\alpha$	PPAR $\alpha$ : -7.4	PPAR $\alpha$ : -7.1	PPAR $\alpha$ : -3.6	PPAR $\alpha$ : -7.1	PPAR $\alpha$ : -8.1	PPAR $\alpha$ : -6.9	PPAR $\alpha$ : -7.2	PPAR $\alpha$ : -6.3	PPAR $\alpha$ : -7.8	PPAR $\alpha$ : -5.6	PPAR $\alpha$ : -7.5
PPAR $\beta$	PPAR $\beta$ : -7.7	PPAR $\beta$ : -7.4	PPAR $\beta$ : -3.6	PPAR $\beta$ : -7.1	PPAR $\beta$ : -8.4	PPAR $\beta$ : -7.2	PPAR $\beta$ : -6.9	PPAR $\beta$ : -6.6	PPAR $\beta$ : -6.9	PPAR $\beta$ : -6.2	PPAR $\beta$ : -8.2
PPAR $\gamma$	PPAR $\gamma$ : -7.7	PPAR $\gamma$ : -7.3	PPAR $\gamma$ : -3.4	PPAR $\gamma$ : -8.1	PPAR $\gamma$ : -8.0	PPAR $\gamma$ : -7.4	PPAR $\gamma$ : -8.2	PPAR $\gamma$ : -6.2	PPAR $\gamma$ : -7.5	PPAR $\gamma$ : -5.9	PPAR $\gamma$ : -7.8
RXR $\alpha$	RXR $\alpha$ : -8.3	RXR $\alpha$ : -8.4	RXR $\alpha$ : -4.1	RXR $\alpha$ : -7.7	RXR $\alpha$ : -8.6	RXR $\alpha$ : -7.7	RXR $\alpha$ : -8.4	RXR $\alpha$ : -6.0	RXR $\alpha$ : -8.4	RXR $\alpha$ : -5.6	RXR $\alpha$ : -8.0
TR $\alpha$	TR $\alpha$ : -8.9	TR $\alpha$ : -6.7	TR $\alpha$ : -3.9	TR $\alpha$ : -8.4	TR $\alpha$ : -6.9	TR $\alpha$ : -8.1	TR $\alpha$ : -5.3	TR $\alpha$ : -6.8	TR $\alpha$ : -5.8	TR $\alpha$ : -6.2	TR $\alpha$ : -9.0
TR $\beta$	TR $\beta$ : -8.8	TR $\beta$ : -7.8	TR $\beta$ : -3.8	TR $\beta$ : -8.3	TR $\beta$ : -7.4	TR $\beta$ : -7.6	TR $\beta$ : -7.2	TR $\beta$ : -6.8	TR $\beta$ : -6.8	TR $\beta$ : -6.5	TR $\beta$ : -9.1

Spojina	Nalbufin	Nalmefen	Nalokson	Naproxen	Naratriptan	Nateglinid	Natrijev fenilbutirat	Natrijev glicerilfosfat	Natrijev laktat	Natrijev metamizolat	Natrijev oksibat
AR	AR : -4.1	AR : -3.8	AR : -6.4	AR : -8.2	AR : -7.3	AR : -7.5	AR : -6.8	AR : -4.6	AR : -4.0	AR : -7.0	AR : -4.4
AR an.	AR an.: -7.2	AR an.: -7.5	AR an.: -7.3	AR an.: -8.2	AR an.: -7.5	AR an.: -8.1	AR an.: -6.7	AR an.: -4.4	AR an.: -3.8	AR an.: -7.3	AR an.: -3.7
ER $\alpha$	ER $\alpha$ : -8.0	ER $\alpha$ : -8.8	ER $\alpha$ : -8.2	ER $\alpha$ : -7.4	ER $\alpha$ : -8.7	ER $\alpha$ : -8.0	ER $\alpha$ : -6.0	ER $\alpha$ : -4.8	ER $\alpha$ : -3.6	ER $\alpha$ : -7.1	ER $\alpha$ : -3.8
ER $\alpha$ an.	ER $\alpha$ an.: -7.8	ER $\alpha$ an.: -8.3	ER $\alpha$ an.: -7.2	ER $\alpha$ an.: -7.6	ER $\alpha$ an.: -8.1	ER $\alpha$ an.: -7.7	ER $\alpha$ an.: -6.0	ER $\alpha$ an.: -4.3	ER $\alpha$ an.: -3.5	ER $\alpha$ an.: -6.2	ER $\alpha$ an.: -3.9
ER $\beta$	ER $\beta$ : -7.0	ER $\beta$ : -6.9	ER $\beta$ : -7.5	ER $\beta$ : -7.5	ER $\beta$ : -8.9	ER $\beta$ : -7.8	ER $\beta$ : -6.1	ER $\beta$ : -4.5	ER $\beta$ : -4.0	ER $\beta$ : -6.4	ER $\beta$ : -4.2
ER $\beta$ an.	ER $\beta$ an.: -6.2	ER $\beta$ an.: -8.4	ER $\beta$ an.: -6.8	ER $\beta$ an.: -7.4	ER $\beta$ an.: -7.6	ER $\beta$ an.: -7.8	ER $\beta$ an.: -6.0	ER $\beta$ an.: -4.1	ER $\beta$ an.: -3.3	ER $\beta$ an.: -6.9	ER $\beta$ an.: -3.9
GR	GR: -8.1	GR: -7.8	GR: -7.4	GR: -7.8	GR: -8.5	GR: -8.9	GR: -6.3	GR: -4.2	GR: -4.1	GR: -8.1	GR: -4.1
GR an.	GR an.: -8.6	GR an.: -8.7	GR an.: -7.6	GR an.: -6.7	GR an.: -7.5	GR an.: -7.5	GR an.: -5.5	GR an.: -4.1	GR an.: -3.5	GR an.: -6.8	GR an.: -4.0
LXR $\alpha$	LXR $\alpha$ : -6.5	LXR $\alpha$ : -9.0	LXR $\alpha$ : -7.8	LXR $\alpha$ : -8.5	LXR $\alpha$ : -9.7	LXR $\alpha$ : -9.6	LXR $\alpha$ : -6.4	LXR $\alpha$ : -4.2	LXR $\alpha$ : -3.4	LXR $\alpha$ : -7.9	LXR $\alpha$ : -3.7
LXR $\beta$	LXR $\beta$ : -8.0	LXR $\beta$ : -10.0	LXR $\beta$ : -8.3	LXR $\beta$ : -8.8	LXR $\beta$ : -9.7	LXR $\beta$ : -9.6	LXR $\beta$ : -6.5	LXR $\beta$ : -4.2	LXR $\beta$ : -3.6	LXR $\beta$ : -7.9	LXR $\beta$ : -3.7
PPAR $\alpha$	PPAR $\alpha$ : -6.9	PPAR $\alpha$ : -7.1	PPAR $\alpha$ : -7.5	PPAR $\alpha$ : -6.9	PPAR $\alpha$ : -8.0	PPAR $\alpha$ : -7.6	PPAR $\alpha$ : -6.0	PPAR $\alpha$ : -4.3	PPAR $\alpha$ : -3.7	PPAR $\alpha$ : -6.6	PPAR $\alpha$ : -4.0
PPAR $\beta$	PPAR $\beta$ : -6.0	PPAR $\beta$ : -7.3	PPAR $\beta$ : -7.1	PPAR $\beta$ : -7.7	PPAR $\beta$ : -6.7	PPAR $\beta$ : -8.6	PPAR $\beta$ : -6.4	PPAR $\beta$ : -4.5	PPAR $\beta$ : -3.4	PPAR $\beta$ : -7.5	PPAR $\beta$ : -4.0
PPAR $\gamma$	PPAR $\gamma$ : -7.2	PPAR $\gamma$ : -7.0	PPAR $\gamma$ : -7.0	PPAR $\gamma$ : -7.6	PPAR $\gamma$ : -6.4	PPAR $\gamma$ : -8.7	PPAR $\gamma$ : -6.6	PPAR $\gamma$ : -4.2	PPAR $\gamma$ : -3.5	PPAR $\gamma$ : -7.4	PPAR $\gamma$ : -3.9
RXR $\alpha$	RXR $\alpha$ : -5.6	RXR $\alpha$ : -8.4	RXR $\alpha$ : -6.8	RXR $\alpha$ : -8.4	RXR $\alpha$ : -10.0	RXR $\alpha$ : -9.9	RXR $\alpha$ : -6.8	RXR $\alpha$ : -4.4	RXR $\alpha$ : -4.4	RXR $\alpha$ : -7.7	RXR $\alpha$ : -4.6
TR $\alpha$	TR $\alpha$ : 1.9	TR $\alpha$ : -3.0	TR $\alpha$ : -2.4	TR $\alpha$ : -8.6	TR $\alpha$ : -6.4	TR $\alpha$ : -8.7	TR $\alpha$ : -6.8	TR $\alpha$ : -4.4	TR $\alpha$ : -4.1	TR $\alpha$ : -7.8	TR $\alpha$ : -4.1

TR β	TR β: -0.3	TR β: -5.1	TR β: -5.5	TR β: -8.2	TR β: -8.0	TR β: -9.0	TR β: -6.5	TR β: -4.8	TR β: -3.7	TR β: -8.1	TR β: -4.2
------	------------	------------	------------	------------	------------	------------	------------	------------	------------	------------	------------

Spojina	Natrijev tienaptimat	Nelarabin	Neomicin	Nepafenak	Nevirapin	Nicergolin	Nifedipin	Nikoboksil	Nikotin	Nikotinamid	Nikotinska kislina
AR	AR : -3.9	AR : -7.4	AR : 9.4	AR : -8.1	AR : -5.3	AR : -0.6	AR : -4.4	AR : -5.7	AR : -6.3	AR : -5.4	AR : -5.4
AR an.	AR an.: -5.2	AR an.: -7.7	AR an.: 9.3	AR an.: -8.2	AR an.: -6.7	AR an.: -3.6	AR an.: -5.6	AR an.: -5.6	AR an.: -6.8	AR an.: -5.5	AR an.: -4.8
ER α	ER α: -6.8	ER α: -6.9	ER α: -6.0	ER α: -8.7	ER α: -8.7	ER α: -8.8	ER α: -8.4	ER α: -5.9	ER α: -6.0	ER α: -5.4	ER α: -5.0
ER α an.	ER α an.: -8.0	ER α an.: -6.5	ER α an.: -7.5	ER α an.: -8.6	ER α an.: -7.8	ER α an.: -9.3	ER α an.: -7.5	ER α an.: -5.5	ER α an.: -5.8	ER α an.: -5.2	ER α an.: -4.6
ER β	ER β: -4.7	ER β: -6.4	ER β: 7.6	ER β: -8.5	ER β: -7.5	ER β: -5.8	ER β: -7.3	ER β: -5.9	ER β: -6.0	ER β: -5.3	ER β: -4.9
ER β an.	ER β an.: -6.3	ER β an.: -6.3	ER β an.: -7.1	ER β an.: -8.2	ER β an.: -6.5	ER β an.: -8.2	ER β an.: -7.8	ER β an.: -5.9	ER β an.: -5.9	ER β an.: -5.1	ER β an.: -4.7
GR	GR: -8.3	GR: -7.0	GR: -7.4	GR: -8.4	GR: -7.9	GR: -8.8	GR: -6.8	GR: -6.1	GR: -6.6	GR: -5.3	GR: -5.1
GR an.	GR an.: -7.6	GR an.: -6.3	GR an.: -9.7	GR an.: -7.5	GR an.: -7.8	GR an.: -9.5	GR an.: -7.3	GR an.: -5.1	GR an.: -5.4	GR an.: -5.2	GR an.: -4.7
LXR α	LXR α: -7.6	LXR α: -7.2	LXR α: -7.8	LXR α: -9.3	LXR α: -8.9	LXR α: -9.3	LXR α: -5.9	LXR α: -6.0	LXR α: -6.6	LXR α: -5.2	LXR α: -5.2
LXR β	LXR β: -8.8	LXR β: -7.5	LXR β: -7.9	LXR β: -9.0	LXR β: -8.7	LXR β: -10.6	LXR β: -6.9	LXR β: -6.0	LXR β: -6.5	LXR β: -5.5	LXR β: -5.1
PPAR α	PPAR α: -7.6	PPAR α: -7.2	PPAR α: -4.5	PPAR α: -7.9	PPAR α: -7.7	PPAR α: -8.8	PPAR α: -6.5	PPAR α: -6.1	PPAR α: -5.5	PPAR α: -5.0	PPAR α: -4.8
PPAR β	PPAR β: -7.5	PPAR β: -7.3	PPAR β: -6.9	PPAR β: -8.7	PPAR β: -7.5	PPAR β: -8.5	PPAR β: -5.8	PPAR β: -6.2	PPAR β: -6.2	PPAR β: -5.1	PPAR β: -4.9
PPAR γ	PPAR γ: -7.6	PPAR γ: -6.5	PPAR γ: -7.2	PPAR γ: -8.2	PPAR γ: -7.3	PPAR γ: -8.5	PPAR γ: -5.7	PPAR γ: -6.5	PPAR γ: -6.0	PPAR γ: -5.1	PPAR γ: -5.0
RXR α	RXR α: -10.5	RXR α: -6.7	RXR α: -0.3	RXR α: -8.5	RXR α: -8.5	RXR α: -8.9	RXR α: -7.5	RXR α: -6.5	RXR α: -6.4	RXR α: -5.7	RXR α: -5.6
TR α	TR α: -6.0	TR α: -7.2	TR α: 4.1	TR α: -8.8	TR α: -7.9	TR α: -3.5	TR α: -4.7	TR α: -6.3	TR α: -6.3	TR α: -5.2	TR α: -4.9
TR β	TR β: -7.1	TR β: -7.1	TR β: 0.9	TR β: -9.0	TR β: -8.7	TR β: -5.7	TR β: -5.8	TR β: -6.0	TR β: -6.3	TR β: -5.6	TR β: -4.8

Spojina	Nimesulid	Nimodipin	Nitrazepam	Nitrendipin	Nitroksolin	Nomegestro lacetat	Noretisteron acetat	Norfloksacin	Norgestimatin	Ocetna kislina	Oksibutinin
AR	AR : -6.5	AR : -2.3	AR : -3.3	AR : -5.1	AR : -6.7	AR : -5.5	AR : -7.2	AR : -7.5	AR : -5.7	AR : -3.2	AR : -6.0
AR an.	AR an.: -7.9	AR an.: -4.9	AR an.: -7.1	AR an.: -5.0	AR an.: -6.6	AR an.: -6.5	AR an.: -7.6	AR an.: -7.2	AR an.: -5.7	AR an.: -2.9	AR an.: -6.8
ER α	ER α: -7.9	ER α: -7.5	ER α: -8.8	ER α: -7.8	ER α: -6.3	ER α: -7.1	ER α: -7.1	ER α: -7.9	ER α: -4.5	ER α: -2.7	ER α: -7.9
ER α an.	ER α an.: -7.5	ER α an.: -5.8	ER α an.: -8.7	ER α an.: -7.0	ER α an.: -6.7	ER α an.: -7.4	ER α an.: -8.2	ER α an.: -6.3	ER α an.: -6.6	ER α an.: -2.5	ER α an.: -7.9
ER β	ER β: -8.1	ER β: -4.2	ER β: -9.0	ER β: -6.8	ER β: -6.6	ER β: -4.6	ER β: -7.1	ER β: -6.9	ER β: -3.9	ER β: -2.7	ER β: -7.8
ER β an.	ER β an.: -7.9	ER β an.: -7.3	ER β an.: -9.1	ER β an.: -8.2	ER β an.: -6.5	ER β an.: -7.1	ER β an.: -6.1	ER β an.: -6.5	ER β an.: -5.8	ER β an.: -2.6	ER β an.: -7.7
GR	GR: -7.4	GR: -7.1	GR: -8.3	GR: -6.6	GR: -6.7	GR: -9.9	GR: -8.0	GR: -8.5	GR: -8.5	GR: -3.0	GR: -7.6
GR an.	GR an.: -7.1	GR an.: -7.1	GR an.: -8.3	GR an.: -7.6	GR an.: -6.5	GR an.: -8.3	GR an.: -7.9	GR an.: -7.2	GR an.: -8.1	GR an.: -2.7	GR an.: -7.0
LXR α	LXR α: -8.6	LXR α: -6.7	LXR α: -9.3	LXR α: -6.8	LXR α: -6.7	LXR α: -9.1	LXR α: -9.9	LXR α: -8.6	LXR α: -8.1	LXR α: -2.6	LXR α: -9.1
LXR β	LXR β: -8.0	LXR β: -7.6	LXR β: -8.2	LXR β: -7.2	LXR β: -7.4	LXR β: -11.1	LXR β: -10.2	LXR β: -9.5	LXR β: -10.6	LXR β: -2.4	LXR β: -8.2
PPAR α	PPAR α: -7.9	PPAR α: -7.0	PPAR α: -8.8	PPAR α: -7.3	PPAR α: -6.4	PPAR α: -4.8	PPAR α: -5.8	PPAR α: -7.3	PPAR α: -4.9	PPAR α: -2.5	PPAR α: -7.6
PPAR β	PPAR β: -7.1	PPAR β: -7.4	PPAR β: -8.0	PPAR β: -6.9	PPAR β: -6.6	PPAR β: -6.6	PPAR β: -6.9	PPAR β: -8.0	PPAR β: -5.5	PPAR β: -2.6	PPAR β: -7.8
PPAR γ	PPAR γ: -7.6	PPAR γ: -6.6	PPAR γ: -7.7	PPAR γ: -6.4	PPAR γ: -6.1	PPAR γ: -7.2	PPAR γ: -6.3	PPAR γ: -7.8	PPAR γ: -6.4	PPAR γ: -2.7	PPAR γ: -7.9
RXR α	RXR α: -7.7	RXR α: -7.7	RXR α: -8.0	RXR α: -8.1	RXR α: -6.6	RXR α: -8.7	RXR α: -7.9	RXR α: -7.9	RXR α: -6.4	RXR α: -3.4	RXR α: -7.6
TR α	TR α: -6.8	TR α: -4.7	TR α: -5.9	TR α: -5.2	TR α: -7.2	TR α: -5.9	TR α: -6.3	TR α: -8.8	TR α: -2.5	TR α: -2.5	TR α: -7.9
TR β	TR β: -7.6	TR β: -5.2	TR β: -8.0	TR β: -6.1	TR β: -6.9	TR β: -6.2	TR β: -8.9	TR β: -9.0	TR β: -7.2	TR β: -2.6	TR β: -8.9

Spojina	Oksikodon	Oksimetazol in	Olanzapine	Omeprazole	Ondansetro n	Orlistat	Oseltamivir	Ornitin	Oteracil	Pamidronsk a kislina	Pantoprazol e
AR	AR : -6.5	AR : -6.7	AR : -3.5	AR : -4.8	AR : -7.5	AR : -3.0	AR : -6.2	AR : -4.3	AR : -5.6	AR : -5.2	AR : -4.9
AR an.	AR an.: -8.4	AR an.: -7.2	AR an.: -6.6	AR an.: -6.6	AR an.: -7.7	AR an.: -3.0	AR an.: -6.7	AR an.: -4.4	AR an.: -5.3	AR an.: -5.1	AR an.: -5.9
ER α	ER α: -8.4	ER α: -7.2	ER α: -7.5	ER α: -7.7	ER α: -8.0	ER α: -7.4	ER α: -6.9	ER α: -5.0	ER α: -5.7	ER α: -4.5	ER α: -7.9
ER α an.	ER α an.: -7.7	ER α an.: -7.5	ER α an.: -8.1	ER α an.: -7.9	ER α an.: -8.4	ER α an.: -7.3	ER α an.: -6.8	ER α an.: -4.2	ER α an.: -4.9	ER α an.: -4.4	ER α an.: -7.3



ER $\beta$	ER $\beta$ : -8.6	ER $\beta$ : -6.5	ER $\beta$ : -5.4	ER $\beta$ : -7.4	ER $\beta$ : -7.3	ER $\beta$ : -5.3	ER $\beta$ : -6.1	ER $\beta$ : -4.8	ER $\beta$ : -5.8	ER $\beta$ : -4.5	ER $\beta$ : -7.5
ER $\beta$ an.	ER $\beta$ an.: -7.1	ER $\beta$ an.: -7.0	ER $\beta$ an.: -8.0	ER $\beta$ an.: -7.1	ER $\beta$ an.: -8.0	ER $\beta$ an.: -6.3	ER $\beta$ an.: -7.2	ER $\beta$ an.: -4.3	ER $\beta$ an.: -4.9	ER $\beta$ an.: -4.3	ER $\beta$ an.: -7.3
GR	GR: -9.0	GR: -7.7	GR: -6.3	GR: -9.2	GR: -9.1	GR: -7.5	GR: -7.0	GR: -4.3	GR: -5.3	GR: -5.0	GR: -8.7
GR an.	GR an.: -8.5	GR an.: -6.2	GR an.: -8.2	GR an.: -8.2	GR an.: -8.3	GR an.: -6.6	GR an.: -6.8	GR an.: -4.5	GR an.: -5.2	GR an.: -4.4	GR an.: -7.6
LXR $\alpha$	LXR $\alpha$ : -8.7	LXR $\alpha$ : -8.4	LXR $\alpha$ : -8.1	LXR $\alpha$ : -9.3	LXR $\alpha$ : -9.7	LXR $\alpha$ : -7.5	LXR $\alpha$ : -7.7	LXR $\alpha$ : -4.3	LXR $\alpha$ : -5.2	LXR $\alpha$ : -5.0	LXR $\alpha$ : -8.7
LXR $\beta$	LXR $\beta$ : -9.0	LXR $\beta$ : -9.5	LXR $\beta$ : -7.2	LXR $\beta$ : -9.3	LXR $\beta$ : -10.1	LXR $\beta$ : -8.3	LXR $\beta$ : -7.5	LXR $\beta$ : -4.3	LXR $\beta$ : -5.4	LXR $\beta$ : -5.3	LXR $\beta$ : -9.1
PPAR $\alpha$	PPAR $\alpha$ : -7.8	PPAR $\alpha$ : -7.6	PPAR $\alpha$ : -6.9	PPAR $\alpha$ : -7.9	PPAR $\alpha$ : -8.3	PPAR $\alpha$ : -7.5	PPAR $\alpha$ : -7.1	PPAR $\alpha$ : -4.5	PPAR $\alpha$ : -5.2	PPAR $\alpha$ : -5.0	PPAR $\alpha$ : -7.9
PPAR $\beta$	PPAR $\beta$ : -6.7	PPAR $\beta$ : -8.2	PPAR $\beta$ : -7.8	PPAR $\beta$ : -8.4	PPAR $\beta$ : -8.9	PPAR $\beta$ : -8.0	PPAR $\beta$ : -7.4	PPAR $\beta$ : -4.7	PPAR $\beta$ : -5.6	PPAR $\beta$ : -5.6	PPAR $\beta$ : -8.4
PPAR $\gamma$	PPAR $\gamma$ : -6.2	PPAR $\gamma$ : -6.9	PPAR $\gamma$ : -7.3	PPAR $\gamma$ : -8.0	PPAR $\gamma$ : -8.2	PPAR $\gamma$ : -7.8	PPAR $\gamma$ : -6.9	PPAR $\gamma$ : -4.3	PPAR $\gamma$ : -4.9	PPAR $\gamma$ : -4.8	PPAR $\gamma$ : -8.4
RXR $\alpha$	RXR $\alpha$ : -7.4	RXR $\alpha$ : -7.7	RXR $\alpha$ : -8.6	RXR $\alpha$ : -9.5	RXR $\alpha$ : -8.2	RXR $\alpha$ : -8.0	RXR $\alpha$ : -7.5	RXR $\alpha$ : -4.5	RXR $\alpha$ : -5.6	RXR $\alpha$ : -4.3	RXR $\alpha$ : -8.3
TR $\alpha$	TR $\alpha$ : -3.9	TR $\alpha$ : -7.7	TR $\alpha$ : -4.6	TR $\alpha$ : -7.9	TR $\alpha$ : -8.5	TR $\alpha$ : -5.4	TR $\alpha$ : -5.9	TR $\alpha$ : -4.8	TR $\alpha$ : -5.7	TR $\alpha$ : -4.2	TR $\alpha$ : -7.0
TR $\beta$	TR $\beta$ : -7.4	TR $\beta$ : -8.2	TR $\beta$ : -5.2	TR $\beta$ : -8.3	TR $\beta$ : -8.8	TR $\beta$ : -6.1	TR $\beta$ : -7.3	TR $\beta$ : -4.8	TR $\beta$ : -5.8	TR $\beta$ : -5.4	TR $\beta$ : -8.7

Spojina	Paracetamol	Parikalcitrol	Pazopanib	Pefloksacin	Pemetreksed	Pentazocin	Pentoksifilin	Perindopril	Permetrin	Piksantron	Pilokarpin
AR	AR: -6.3	AR: -0.0	AR: -0.1	AR: -7.4	AR: -6.0	AR: -6.8	AR: -6.9	AR: -5.9	AR: -6.6	AR: -3.4	AR: -6.7
AR an.	AR an.: -6.3	AR an.: 0.2	AR an.: -1.2	AR an.: -6.1	AR an.: -6.9	AR an.: -7.8	AR an.: -6.9	AR an.: -7.3	AR an.: -6.5	AR an.: -6.1	AR an.: -6.5
ER $\alpha$	ER $\alpha$ : -5.9	ER $\alpha$ : -6.2	ER $\alpha$ : -8.8	ER $\alpha$ : -4.9	ER $\alpha$ : -8.2	ER $\alpha$ : -8.3	ER $\alpha$ : -7.0	ER $\alpha$ : -7.0	ER $\alpha$ : -8.4	ER $\alpha$ : -7.1	ER $\alpha$ : -6.4
ER $\alpha$ an.	ER $\alpha$ an.: -5.9	ER $\alpha$ an.: -8.0	ER $\alpha$ an.: -8.7	ER $\alpha$ an.: -6.0	ER $\alpha$ an.: -8.6	ER $\alpha$ an.: -8.6	ER $\alpha$ an.: -6.9	ER $\alpha$ an.: -6.8	ER $\alpha$ an.: -8.8	ER $\alpha$ an.: -6.7	ER $\alpha$ an.: -6.3
ER $\beta$	ER $\beta$ : -6.1	ER $\beta$ : -1.3	ER $\beta$ : -1.4	ER $\beta$ : -3.9	ER $\beta$ : -7.1	ER $\beta$ : -7.1	ER $\beta$ : -7.2	ER $\beta$ : -7.3	ER $\beta$ : -8.6	ER $\beta$ : -5.3	ER $\beta$ : -6.6
ER $\beta$ an.	ER $\beta$ an.: -5.9	ER $\beta$ an.: -7.9	ER $\beta$ an.: -8.2	ER $\beta$ an.: -6.3	ER $\beta$ an.: -8.4	ER $\beta$ an.: -7.8	ER $\beta$ an.: -6.4	ER $\beta$ an.: -6.9	ER $\beta$ an.: -8.1	ER $\beta$ an.: -7.6	ER $\beta$ an.: -6.1
GR	GR: -6.2	GR: -9.5	GR: -8.4	GR: -9.0	GR: -9.4	GR: -8.2	GR: -7.2	GR: -7.8	GR: -9.1	GR: -6.1	GR: -6.8
GR an.	GR an.: -5.6	GR an.: -9.0	GR an.: -9.0	GR an.: -7.3	GR an.: -8.4	GR an.: -7.8	GR an.: -6.4	GR an.: -6.9	GR an.: -8.0	GR an.: -7.1	GR an.: -5.8
LXR $\alpha$	LXR $\alpha$ : -6.0	LXR $\alpha$ : -11.6	LXR $\alpha$ : -10.3	LXR $\alpha$ : -8.7	LXR $\alpha$ : -10.0	LXR $\alpha$ : -8.3	LXR $\alpha$ : -7.5	LXR $\alpha$ : -8.0	LXR $\alpha$ : -10.2	LXR $\alpha$ : -7.3	LXR $\alpha$ : -6.8
LXR $\beta$	LXR $\beta$ : -6.3	LXR $\beta$ : -10.9	LXR $\beta$ : -10.9	LXR $\beta$ : -9.8	LXR $\beta$ : -10.4	LXR $\beta$ : -9.9	LXR $\beta$ : -7.2	LXR $\beta$ : -8.5	LXR $\beta$ : -10.4	LXR $\beta$ : -7.1	LXR $\beta$ : -6.8
PPAR $\alpha$	PPAR $\alpha$ : -5.7	PPAR $\alpha$ : -8.2	PPAR $\alpha$ : -9.5	PPAR $\alpha$ : -6.7	PPAR $\alpha$ : -8.7	PPAR $\alpha$ : -6.5	PPAR $\alpha$ : -6.8	PPAR $\alpha$ : -7.1	PPAR $\alpha$ : -8.5	PPAR $\alpha$ : -7.5	PPAR $\alpha$ : -6.2
PPAR $\beta$	PPAR $\beta$ : -5.9	PPAR $\beta$ : -8.9	PPAR $\beta$ : -9.9	PPAR $\beta$ : -8.1	PPAR $\beta$ : -8.8	PPAR $\beta$ : -6.7	PPAR $\beta$ : -6.9	PPAR $\beta$ : -7.5	PPAR $\beta$ : -8.8	PPAR $\beta$ : -7.6	PPAR $\beta$ : -5.9
PPAR $\gamma$	PPAR $\gamma$ : -5.6	PPAR $\gamma$ : -7.4	PPAR $\gamma$ : -10.1	PPAR $\gamma$ : -7.1	PPAR $\gamma$ : -8.8	PPAR $\gamma$ : -7.0	PPAR $\gamma$ : -7.1	PPAR $\gamma$ : -6.9	PPAR $\gamma$ : -9.2	PPAR $\gamma$ : -7.3	PPAR $\gamma$ : -6.5
RXR $\alpha$	RXR $\alpha$ : -6.4	RXR $\alpha$ : -10.3	RXR $\alpha$ : -9.9	RXR $\alpha$ : -8.2	RXR $\alpha$ : -8.7	RXR $\alpha$ : -8.8	RXR $\alpha$ : -7.8	RXR $\alpha$ : -8.1	RXR $\alpha$ : -10.6	RXR $\alpha$ : -7.3	RXR $\alpha$ : -7.1
TR $\alpha$	TR $\alpha$ : -6.4	TR $\alpha$ : -7.9	TR $\alpha$ : -5.9	TR $\alpha$ : -8.2	TR $\alpha$ : -7.7	TR $\alpha$ : -5.9	TR $\alpha$ : -7.5	TR $\alpha$ : -6.5	TR $\alpha$ : -9.4	TR $\alpha$ : -3.5	TR $\alpha$ : -6.8
TR $\beta$	TR $\beta$ : -6.0	TR $\beta$ : -8.5	TR $\beta$ : -7.5	TR $\beta$ : -8.5	TR $\beta$ : -8.4	TR $\beta$ : -8.8	TR $\beta$ : -7.4	TR $\beta$ : -6.9	TR $\beta$ : -10.1	TR $\beta$ : -4.5	TR $\beta$ : -6.7

Spojina	Pindolol	Pinen	Pipemidna kislina	Piperacilin	Piracetam	Pirazinamid	Pirfenidon	Piridoksin	Polikrezulen	Polistirensulfonat	Posakonazol
AR	AR: -7.2	AR: -6.3	AR: -8.1	AR: 4.4	AR: -5.3	AR: -5.0	AR: -7.3	AR: -5.9	AR: 7.9	AR: -6.0	AR: 11.3
AR an.	AR an.: -7.1	AR an.: -6.2	AR an.: -7.4	AR an.: -1.7	AR an.: -5.6	AR an.: -4.8	AR an.: -7.3	AR an.: -6.2	AR an.: 6.5	AR an.: -5.9	AR an.: 10.5
ER $\alpha$	ER $\alpha$ : -6.9	ER $\alpha$ : -6.0	ER $\alpha$ : -7.4	ER $\alpha$ : -4.6	ER $\alpha$ : -4.9	ER $\alpha$ : -4.9	ER $\alpha$ : -7.4	ER $\alpha$ : -5.8	ER $\alpha$ : -5.1	ER $\alpha$ : -6.1	ER $\alpha$ : -6.6
ER $\alpha$ an.	ER $\alpha$ an.: -6.7	ER $\alpha$ an.: -6.5	ER $\alpha$ an.: -6.8	ER $\alpha$ an.: -7.5	ER $\alpha$ an.: -5.1	ER $\alpha$ an.: -4.6	ER $\alpha$ an.: -7.2	ER $\alpha$ an.: -5.5	ER $\alpha$ an.: -7.2	ER $\alpha$ an.: -6.2	ER $\alpha$ an.: -8.5
ER $\beta$	ER $\beta$ : -7.1	ER $\beta$ : -6.3	ER $\beta$ : -6.9	ER $\beta$ : 1.1	ER $\beta$ : -5.2	ER $\beta$ : -5.0	ER $\beta$ : -7.3	ER $\beta$ : -5.6	ER $\beta$ : 3.1	ER $\beta$ : -6.2	ER $\beta$ : 5.3
ER $\beta$ an.	ER $\beta$ an.: -6.9	ER $\beta$ an.: -6.0	ER $\beta$ an.: -6.3	ER $\beta$ an.: -6.2	ER $\beta$ an.: -4.9	ER $\beta$ an.: -4.5	ER $\beta$ an.: -7.1	ER $\beta$ an.: -5.5	ER $\beta$ an.: -6.2	ER $\beta$ an.: -5.9	ER $\beta$ an.: -8.1
GR	GR: -6.6	GR: -5.1	GR: -8.1	GR: -5.7	GR: -5.1	GR: -4.9	GR: -7.7	GR: -5.4	GR: -8.6	GR: -5.7	GR: -5.3
GR an.	GR an.: -6.3	GR an.: -6.0	GR an.: -7.3	GR an.: -8.3	GR an.: -5.0	GR an.: -4.6	GR an.: -6.8	GR an.: -5.3	GR an.: -8.4	GR an.: -5.9	GR an.: -9.8
LXR $\alpha$	LXR $\alpha$ : -7.2	LXR $\alpha$ : -6.5	LXR $\alpha$ : -8.4	LXR $\alpha$ : -9.2	LXR $\alpha$ : -5.4	LXR $\alpha$ : -4.5	LXR $\alpha$ : -7.8	LXR $\alpha$ : -5.9	LXR $\alpha$ : -8.5	LXR $\alpha$ : -6.4	LXR $\alpha$ : -9.0
LXR $\beta$	LXR $\beta$ : -7.5	LXR $\beta$ : -6.4	LXR $\beta$ : -8.6	LXR $\beta$ : -9.8	LXR $\beta$ : -5.3	LXR $\beta$ : -4.8	LXR $\beta$ : -7.7	LXR $\beta$ : -6.1	LXR $\beta$ : -9.3	LXR $\beta$ : -6.7	LXR $\beta$ : 1.3
PPAR $\alpha$	PPAR $\alpha$ : -7.3	PPAR $\alpha$ : -5.8	PPAR $\alpha$ : -7.2	PPAR $\alpha$ : -5.4	PPAR $\alpha$ : -5.0	PPAR $\alpha$ : -4.5	PPAR $\alpha$ : -7.1	PPAR $\alpha$ : -5.8	PPAR $\alpha$ : -7.6	PPAR $\alpha$ : -5.7	PPAR $\alpha$ : -7.9
PPAR $\beta$	PPAR $\beta$ : -7.1	PPAR $\beta$ : -6.2	PPAR $\beta$ : -7.5	PPAR $\beta$ : -7.1	PPAR $\beta$ : -5.4	PPAR $\beta$ : -4.7	PPAR $\beta$ : -7.7	PPAR $\beta$ : -5.5	PPAR $\beta$ : -9.3	PPAR $\beta$ : -6.3	PPAR $\beta$ : -8.5
PPAR $\gamma$	PPAR $\gamma$ : -7.0	PPAR $\gamma$ : -5.3	PPAR $\gamma$ : -7.3	PPAR $\gamma$ : -6.4	PPAR $\gamma$ : -4.9	PPAR $\gamma$ : -4.5	PPAR $\gamma$ : -7.2	PPAR $\gamma$ : -5.4	PPAR $\gamma$ : -9.1	PPAR $\gamma$ : -5.8	PPAR $\gamma$ : -8.0
RXR $\alpha$	RXR $\alpha$ : -7.2	RXR $\alpha$ : -6.2	RXR $\alpha$ : -7.4	RXR $\alpha$ : -3.6	RXR $\alpha$ : -5.2	RXR $\alpha$ : -5.0	RXR $\alpha$ : -7.4	RXR $\alpha$ : -5.4	RXR $\alpha$ : -6.9	RXR $\alpha$ : -6.0	RXR $\alpha$ : -0.9
TR $\alpha$	TR $\alpha$ : -7.5	TR $\alpha$ : -6.7	TR $\alpha$ : -8.5	TR $\alpha$ : -0.9	TR $\alpha$ : -4.8	TR $\alpha$ : -4.7	TR $\alpha$ : -7.9	TR $\alpha$ : -6.0	TR $\alpha$ : -1.1	TR $\alpha$ : -6.7	TR $\alpha$ : 5.4

TR β	TR β: -7.3	TR β: -6.4	TR β: -8.7	TR β: -1.9	TR β: -4.9	TR β: -5.3	TR β: -7.8	TR β: -5.5	TR β: -2.8	TR β: -6.4	TR β: 4.8
------	------------	------------	------------	------------	------------	------------	------------	------------	------------	------------	-----------

Spojina	Pramipeksol	Prasugrel	Pravastatin	Pregabalin	Progvanil	Proksimetakain	Prolin	Promazin	Propafenon	Propifenazon	Propiverin
AR	AR : -6.4	AR : -7.0	AR : -5.4	AR : -5.7	AR : -6.6	AR : -6.4	AR : -4.5	AR : -7.1	AR : -6.7	AR : -7.6	AR : -4.3
AR an.	AR an.: -6.5	AR an.: -6.6	AR an.: -6.1	AR an.: -5.7	AR an.: -6.8	AR an.: -6.3	AR an.: -4.3	AR an.: -7.8	AR an.: -7.1	AR an.: -7.6	AR an.: -7.3
ER α	ER α: -6.4	ER α: -7.4	ER α: -7.5	ER α: -5.2	ER α: -6.8	ER α: -6.5	ER α: -4.6	ER α: -7.6	ER α: -8.3	ER α: -7.9	ER α: -8.4
ER α an.	ER α an.: -6.4	ER α an.: -8.5	ER α an.: -7.0	ER α an.: -5.2	ER α an.: -6.8	ER α an.: -6.1	ER α an.: -4.3	ER α an.: -7.5	ER α an.: -7.3	ER α an.: -7.4	ER α an.: -8.2
ER β	ER β: -6.3	ER β: -6.9	ER β: -6.1	ER β: -4.9	ER β: -6.9	ER β: -6.1	ER β: -4.6	ER β: -7.7	ER β: -7.4	ER β: -7.7	ER β: -7.0
ER β an.	ER β an.: -6.4	ER β an.: -8.0	ER β an.: -7.1	ER β an.: -5.0	ER β an.: -6.5	ER β an.: -6.0	ER β an.: -4.2	ER β an.: -7.9	ER β an.: -7.4	ER β an.: -7.7	ER β an.: -7.4
GR	GR: -5.9	GR: -9.2	GR: -8.3	GR: -4.8	GR: -7.4	GR: -6.5	GR: -4.5	GR: -7.2	GR: -7.8	GR: -7.6	GR: -8.3
GR an.	GR an.: -5.9	GR an.: -8.1	GR an.: -7.6	GR an.: -5.0	GR an.: -6.2	GR an.: -6.0	GR an.: -4.4	GR an.: -7.0	GR an.: -7.0	GR an.: -6.8	GR an.: -7.9
LXR α	LXR α: -6.5	LXR α: -8.8	LXR α: -8.8	LXR α: -5.2	LXR α: -7.3	LXR α: -7.0	LXR α: -4.5	LXR α: -8.3	LXR α: -8.8	LXR α: -7.9	LXR α: -8.3
LXR β	LXR β: -6.9	LXR β: -10.2	LXR β: -8.7	LXR β: -5.5	LXR β: -7.3	LXR β: -7.0	LXR β: -4.4	LXR β: -7.9	LXR β: -8.1	LXR β: -8.0	LXR β: -9.4
PPAR α	PPAR α: -6.1	PPAR α: -8.7	PPAR α: -7.4	PPAR α: -4.9	PPAR α: -6.7	PPAR α: -6.3	PPAR α: -4.2	PPAR α: -7.3	PPAR α: -8.3	PPAR α: -7.0	PPAR α: -8.0
PPAR β	PPAR β: -6.3	PPAR β: -9.1	PPAR β: -7.4	PPAR β: -5.3	PPAR β: -7.0	PPAR β: -6.8	PPAR β: -4.2	PPAR β: -7.6	PPAR β: -8.6	PPAR β: -8.1	PPAR β: -8.6
PPAR γ	PPAR γ: -5.7	PPAR γ: -8.4	PPAR γ: -7.1	PPAR γ: -5.1	PPAR γ: -7.2	PPAR γ: -6.3	PPAR γ: -4.4	PPAR γ: -7.7	PPAR γ: -8.8	PPAR γ: -7.6	PPAR γ: -7.3
RXR α	RXR α: -6.2	RXR α: -9.4	RXR α: -9.3	RXR α: -5.7	RXR α: -7.1	RXR α: -7.0	RXR α: -5.3	RXR α: -7.9	RXR α: -8.6	RXR α: -8.3	RXR α: -8.9
TR α	TR α: -6.4	TR α: -9.2	TR α: -6.0	TR α: -5.2	TR α: -7.0	TR α: -7.4	TR α: -4.2	TR α: -6.1	TR α: -8.8	TR α: -8.4	TR α: -6.4
TR β	TR β: -6.4	TR β: -9.5	TR β: -7.2	TR β: -5.4	TR β: -6.9	TR β: -6.9	TR β: -4.2	TR β: -7.0	TR β: -8.8	TR β: -8.5	TR β: -8.3

Spojina	Propofol	Psevdoefedrin	Propranolol	Rabeprazol	Racekadotril	Raltegravir	Ramipril	Ranitidine	Ranolazin	Razagilin	Reboksetin
AR	AR : -7.1	AR : -5.9	AR : -7.8	AR : -5.6	AR : -6.7	AR : -4.2	AR : -4.1	AR : -6.2	AR : -4.5	AR : -6.6	AR : -5.5
AR an.	AR an.: -7.0	AR an.: -7.0	AR an.: -7.7	AR an.: -7.4	AR an.: -7.6	AR an.: -6.7	AR an.: -6.0	AR an.: -6.1	AR an.: -5.9	AR an.: -6.8	AR : -7.6
ER α	ER α: -6.3	ER α: -5.9	ER α: -7.6	ER α: -7.7	ER α: -8.2	ER α: -7.8	ER α: -7.8	ER α: -5.9	ER α: -7.9	ER α: -6.6	ER α: -8.4
ER α an.	ER α an.: -6.3	ER α an.: -5.6	ER α an.: -7.5	ER α an.: -7.2	ER α an.: -7.9	ER α an.: -7.8	ER α an.: -7.7	ER α an.: -5.7	ER α an.: -8.2	ER α an.: -6.8	ER α: -8.6
ER β	ER β: -6.6	ER β: -5.8	ER β: -7.5	ER β: -7.8	ER β: -7.3	ER β: -5.1	ER β: -5.8	ER β: -5.9	ER β: -5.9	ER β: -6.6	ER β: -8.1
ER β an.	ER β an.: -6.5	ER β an.: -5.9	ER β an.: -7.1	ER β an.: -6.8	ER β an.: -7.7	ER β an.: -7.2	ER β an.: -7.3	ER β an.: -5.1	ER β an.: -7.4	ER β an.: -6.9	ER β: -8.5
GR	GR: -6.6	GR: -6.0	GR: -7.5	GR: -8.5	GR: -7.7	GR: -9.9	GR: -9.2	GR: -6.4	GR: -9.1	GR: -6.3	GR: -7.9
GR an.	GR an.: -6.3	GR an.: -5.6	GR an.: -7.0	GR an.: -7.1	GR an.: -7.4	GR an.: -8.7	GR an.: -8.1	GR an.: -5.7	GR an.: -8.4	GR an.: -6.5	GR: -7.9
LXR α	LXR α: -7.4	LXR α: -6.3	LXR α: -8.0	LXR α: -8.8	LXR α: -9.3	LXR α: -9.5	LXR α: -8.8	LXR α: -6.3	LXR α: -9.4	LXR α: -7.2	LXR α: -8.6
LXR β	LXR β: -7.4	LXR β: -6.6	LXR β: -8.2	LXR β: -8.7	LXR β: -9.1	LXR β: -10.8	LXR β: -9.9	LXR β: -6.5	LXR β: -9.9	LXR β: -7.3	LXR β: -8.4
PPAR α	PPAR α: -6.2	PPAR α: -5.7	PPAR α: -7.4	PPAR α: -8.0	PPAR α: -7.9	PPAR α: -8.6	PPAR α: -8.0	PPAR α: -6.1	PPAR α: -7.9	PPAR α: -6.7	PPAR α: -7.6
PPAR β	PPAR β: -6.7	PPAR β: -6.3	PPAR β: -7.6	PPAR β: -7.8	PPAR β: -8.7	PPAR β: -9.9	PPAR β: -8.6	PPAR β: -6.3	PPAR β: -9.3	PPAR β: -6.9	PPAR β: -7.9
PPAR γ	PPAR γ: -6.1	PPAR γ: -6.0	PPAR γ: -7.3	PPAR γ: -7.6	PPAR γ: -8.8	PPAR γ: -9.1	PPAR γ: -8.9	PPAR γ: -6.0	PPAR γ: -8.5	PPAR γ: -6.3	PPAR γ: -7.7
RXR α	RXR α: -7.1	RXR α: -6.0	RXR α: -7.9	RXR α: -8.6	RXR α: -9.5	RXR α: -9.9	RXR α: -9.8	RXR α: -6.8	RXR α: -9.1	RXR α: -7.0	RXR α: -8.4
TR α	TR α: -7.2	TR α: -6.2	TR α: -8.0	TR α: -8.6	TR α: -8.5	TR α: -6.9	TR α: -8.2	TR α: -7.0	TR α: -6.1	TR α: -7.0	TR α: -8.2
TR β	TR β: -6.8	TR β: -6.3	TR β: -7.9	TR β: -8.5	TR β: -9.4	TR β: -7.5	TR β: -8.2	TR β: -6.7	TR β: -7.6	TR β: -6.7	TR β: -7.5

Spojina	Regadenozon	Remifentani	Repaglinid	Repirol	Reserpin	Retapamulin	Retigabin	Retinol	Ribavirin	Riboflavin (vit. B2)	Rilpivirin
AR	AR : 1.2	AR : -5.9	AR : -2.6	AR : -7.2	AR : 14.4	AR : 3.1	AR : -7.8	AR : -1.5	AR : -7.0	AR : -5.3	AR : 0.3
AR an.	AR an.: -3.5	AR an.: -7.4	AR an.: -5.1	AR an.: -7.3	AR : 10.0	AR : 2.0	AR an.: -7.6	AR an.: -0.5	AR : -6.8	AR an.: -5.8	AR an.: 0.7
ER α	ER α: -7.4	ER α: -7.2	ER α: -7.7	ER α: -7.1	ER α: -5.1	ER α: -5.4	ER α: -8.1	ER α: -7.5	ER α: -6.5	ER α: -7.5	ER α: -7.1
ER α an.	ER α an.: -8.2	ER α an.: -7.4	ER α an.: -8.6	ER α an.: -7.2	ER α: -6.1	ER α: -7.0	ER α an.: -7.4	ER α an.: -7.8	ER α: -6.3	ER α an.: -6.7	ER α an.: -7.9
ER β	ER β: -3.9	ER β: -6.5	ER β: -4.8	ER β: -7.4	ER β: 10.1	ER β: 2.5	ER β: -7.6	ER β: -2.9	ER β: -6.6	ER β: -5.9	ER β: -1.2
ER β an.	ER β an.: -7.9	ER β an.: -6.2	ER β: -7.4	ER β an.: -7.4	ER β: -5.7	ER β: -7.2	ER β an.: -7.8	ER β an.: -7.4	ER β: -6.4	ER β an.: -7.7	ER β an.: -7.4

GR	GR: -8.4	GR: -7.9	GR: -9.4	GR: -6.9	GR: -3.4	GR: -5.5	GR: -8.0	GR: -8.5	GR: -6.5	GR: -8.2	GR: -9.5
GR an.	GR an.: -7.7	GR an.: -6.6	GR an.: -9.0	GR an.: -6.5	GR: -8.6	GR: -8.1	GR an.: -7.4	GR an.: -7.4	GR: -6.0	GR an.: -7.8	GR an.: -8.4
LXR α	LXR α: -9.2	LXR α: -7.2	LXR α: -9.9	LXR α: -7.7	LXR α: -5.0	LXR α: -6.1	LXR α: -8.6	LXR α: -9.8	LXR α: -6.7	LXR α: -8.0	LXR α: -10.2
LXR β	LXR β: -8.6	LXR β: -8.4	LXR β: -10.0	LXR β: -7.9	LXR β: -9.6	LXR β: -9.0	LXR β: -8.8	LXR β: -9.7	LXR β: -6.8	LXR β: -8.0	LXR β: -9.1
PPAR α	PPAR α: -8.7	PPAR α: -7.5	PPAR α: -8.0	PPAR α: -6.9	PPAR α: -5.7	PPAR α: -4.1	PPAR α: -7.8	PPAR α: -7.8	PPAR α: -6.8	PPAR α: -8.0	PPAR α: -8.5
PPAR β	PPAR β: -7.8	PPAR β: -6.6	PPAR β: -8.8	PPAR β: -7.6	PPAR β: -4.7	PPAR β: -7.2	PPAR β: -8.1	PPAR β: -7.6	PPAR β: -6.9	PPAR β: -7.3	PPAR β: -9.2
PPAR γ	PPAR γ: -7.8	PPAR γ: -5.8	PPAR γ: -7.6	PPAR γ: -7.8	PPAR γ: -7.0	PPAR γ: -6.8	PPAR γ: -7.6	PPAR γ: -8.1	PPAR γ: -6.2	PPAR γ: -9.4	PPAR γ: -9.0
RXR α	RXR α: -8.8	RXR α: -7.1	RXR α: -9.9	RXR α: -7.7	RXR α: -2.7	RXR α: -3.5	RXR α: -8.5	RXR α: -9.1	RXR α: -6.5	RXR α: -8.3	RXR α: -8.6
TR α	TR α: -3.8	TR α: -5.9	TR α: -7.2	TR α: -8.1	TR α: 7.6	TR α: 6.2	TR α: -9.2	TR α: -9.3	TR α: -6.8	TR α: -5.2	TR α: -3.8
TR β	TR β: -4.1	TR β: -7.4	TR β: -7.7	TR β: -7.7	TR β: 2.2	TR β: 0.5	TR β: -9.3	TR β: -9.2	TR β: -6.8	TR β: -5.7	TR β: -8.1

Spojina	Riluzol	Riociguat	Risedronska kislina	Rivaroksaban	Rivastigmin	Rizatriptan	Roflumilast	Rokuronijev bromid	Ropinirol	Ropivakainin jev klorid	Rosuvastatin
AR	AR: -7.9	AR: 5.2	AR: -6.4	AR: -6.4	AR: -6.8	AR: -6.7	AR: -6.0	AR: 20.9	AR: -7.2	AR: -7.3	AR: 0.7
AR an.	AR an.: -7.9	AR an.: 1.5	AR an.: -6.5	AR an.: -5.8	AR an.: -6.8	AR an.: -7.0	AR an.: -7.1	AR an.: 17.4	AR an.: -7.3	AR an.: -8.1	AR an.: -5.3
ER α	ER α: -6.7	ER α: -7.3	ER α: -6.0	ER α: -8.5	ER α: -6.8	ER α: -7.3	ER α: -8.3	ER α: -5.3	ER α: -7.3	ER α: -7.7	ER α: -6.8
ER α an.	ER α an.: -7.2	ER α an.: -8.1	ER α an.: -6.1	ER α an.: -9.0	ER α an.: -6.6	ER α an.: -6.7	ER α an.: -7.6	ER α an.: -5.9	ER α an.: -7.2	ER α an.: -8.0	ER α an.: -6.6
ER β	ER β: -6.7	ER β: 6.3	ER β: -6.3	ER β: -4.8	ER β: -6.8	ER β: -7.0	ER β: -7.3	ER β: 9.4	ER β: -7.4	ER β: -7.9	ER β: -3.7
ER β an.	ER β an.: -7.0	ER β an.: -8.7	ER β an.: -5.7	ER β an.: -8.2	ER β an.: -6.8	ER β an.: -7.3	ER β an.: -7.2	ER β an.: -7.2	ER β an.: -7.5	ER β an.: -8.0	ER β an.: -6.4
GR	GR: -6.4	GR: -9.4	GR: -6.5	GR: -10.2	GR: -6.9	GR: -7.6	GR: -8.5	GR: -6.1	GR: -6.9	GR: -7.4	GR: -7.6
GR an.	GR an.: -6.1	GR an.: -9.0	GR an.: -5.7	GR an.: -8.3	GR an.: -6.0	GR an.: -7.1	GR an.: -7.6	GR an.: -9.6	GR an.: -6.5	GR an.: -7.8	GR an.: -7.2
LXR α	LXR α: -7.3	LXR α: -10.0	LXR α: -6.5	LXR α: -9.5	LXR α: -7.8	LXR α: -8.0	LXR α: -8.6	LXR α: -5.2	LXR α: -7.7	LXR α: -8.7	LXR α: -6.1
LXR β	LXR β: -7.9	LXR β: -10.5	LXR β: -6.6	LXR β: -10.2	LXR β: -7.5	LXR β: -8.4	LXR β: -8.6	LXR β: -8.9	LXR β: -8.0	LXR β: -7.9	LXR β: -8.2
PPAR α	PPAR α: -6.6	PPAR α: -8.2	PPAR α: -6.4	PPAR α: -8.7	PPAR α: -6.6	PPAR α: -7.1	PPAR α: -7.5	PPAR α: -2.2	PPAR α: -6.5	PPAR α: -7.1	PPAR α: -7.4
PPAR β	PPAR β: -7.1	PPAR β: -8.5	PPAR β: -6.3	PPAR β: -9.0	PPAR β: -6.7	PPAR β: -7.7	PPAR β: -8.6	PPAR β: -5.4	PPAR β: -7.5	PPAR β: -7.4	PPAR β: -6.5
PPAR γ	PPAR γ: -6.7	PPAR γ: -7.8	PPAR γ: -6.3	PPAR γ: -8.8	PPAR γ: -6.7	PPAR γ: -6.8	PPAR γ: -8.1	PPAR γ: -7.1	PPAR γ: -7.9	PPAR γ: -6.7	PPAR γ: -8.4
RXR α	RXR α: -7.0	RXR α: -8.8	RXR α: -5.9	RXR α: -10.2	RXR α: -7.6	RXR α: -7.7	RXR α: -8.6	RXR α: -2.4	RXR α: -7.3	RXR α: -8.4	RXR α: -7.5
TR α	TR α: -7.6	TR α: -4.9	TR α: -6.3	TR α: -7.9	TR α: -7.4	TR α: -8.2	TR α: -7.6	TR α: 6.8	TR α: -8.0	TR α: -8.1	TR α: -3.6
TR β	TR β: -7.3	TR β: -7.3	TR β: -5.9	TR β: -8.5	TR β: -7.4	TR β: -8.3	TR β: -7.8	TR β: 1.3	TR β: -7.7	TR β: -8.1	TR β: -3.9

Spojina	Rotigotin	Rufinamid	Ruksolitinib	Saksagliptin	Salbutamol	Salicilna kis	Salmeterol	Sapropterin	Sečnina	Selegilin	Serin
AR	AR: -7.1	AR: -8.4	AR: -7.3	AR: -7.5	AR: -6.8	AR: -5.9	AR: -5.7	AR: -7.0	AR: -3.3	AR: -6.4	AR: -4.0
AR an.	AR an.: -7.6	AR an.: -8.1	AR an.: -7.5	AR an.: -8.0	AR an.: -6.6	AR an.: -6.3	AR an.: -6.4	AR an.: -7.0	AR an.: -3.6	AR an.: -6.9	AR an.: -3.8
ER α	ER α: -8.7	ER α: -7.4	ER α: -7.9	ER α: -8.2	ER α: -7.2	ER α: -5.6	ER α: -7.8	ER α: -6.5	ER α: -3.3	ER α: -6.5	ER α: -3.8
ER α an.	ER α an.: -7.9	ER α an.: -7.4	ER α an.: -8.0	ER α an.: -6.8	ER α an.: -7.1	ER α an.: -5.6	ER α an.: -7.3	ER α an.: -7.0	ER α an.: -3.2	ER α an.: -6.3	ER α an.: -3.9
ER β	ER β: -8.0	ER β: -7.7	ER β: -7.9	ER β: -7.0	ER β: -6.8	ER β: -5.7	ER β: -6.1	ER β: -6.7	ER β: -3.1	ER β: -6.5	ER β: -4.0
ER β an.	ER β an.: -7.4	ER β an.: -7.1	ER β an.: -7.5	ER β an.: -6.7	ER β an.: -6.9	ER β an.: -5.5	ER β an.: -6.9	ER β an.: -6.4	ER β an.: -3.1	ER β an.: -6.3	ER β an.: -3.9
GR	GR: -7.7	GR: -7.4	GR: -8.6	GR: -8.0	GR: -6.6	GR: -5.9	GR: -7.5	GR: -6.6	GR: -3.2	GR: -6.6	GR: -4.0
GR an.	GR an.: -7.0	GR an.: -7.1	GR an.: -7.6	GR an.: -6.9	GR an.: -6.3	GR an.: -5.2	GR an.: -7.6	GR an.: -6.1	GR an.: -3.4	GR an.: -5.5	GR an.: -3.7
LXR α	LXR α: -9.0	LXR α: -7.9	LXR α: -8.9	LXR α: -9.2	LXR α: -7.3	LXR α: -5.9	LXR α: -8.6	LXR α: -7.1	LXR α: -3.0	LXR α: -6.8	LXR α: -3.9
LXR β	LXR β: -8.9	LXR β: -7.8	LXR β: -9.1	LXR β: -9.2	LXR β: -7.5	LXR β: -5.8	LXR β: -8.7	LXR β: -7.2	LXR β: -3.0	LXR β: -6.8	LXR β: -3.7
PPAR α	PPAR α: -7.1	PPAR α: -7.0	PPAR α: -7.8	PPAR α: -6.8	PPAR α: -6.6	PPAR α: -5.4	PPAR α: -8.0	PPAR α: -7.0	PPAR α: -3.1	PPAR α: -6.7	PPAR α: -3.8
PPAR β	PPAR β: -7.6	PPAR β: -7.3	PPAR β: -8.5	PPAR β: -7.1	PPAR β: -6.5	PPAR β: -5.7	PPAR β: -8.6	PPAR β: -7.0	PPAR β: -3.2	PPAR β: -6.6	PPAR β: -3.9
PPAR γ	PPAR γ: -7.4	PPAR γ: -7.1	PPAR γ: -7.4	PPAR γ: -6.7	PPAR γ: -6.8	PPAR γ: -5.6	PPAR γ: -8.0	PPAR γ: -6.6	PPAR γ: -3.3	PPAR γ: -6.9	PPAR γ: -3.7
RXR α	RXR α: -7.4	RXR α: -7.6	RXR α: -8.6	RXR α: -9.0	RXR α: -7.8	RXR α: -6.3	RXR α: -9.4	RXR α: -6.5	RXR α: -3.1	RXR α: -6.8	RXR α: -4.2
TR α	TR α: -7.7	TR α: -7.8	TR α: -8.1	TR α: -7.0	TR α: -7.4	TR α: -6.1	TR α: -8.7	TR α: -6.5	TR α: -3.6	TR α: -7.0	TR α: -4.6
TR β	TR β: -8.4	TR β: -8.1	TR β: -8.6	TR β: -8.2	TR β: -7.3	TR β: -5.5	TR β: -8.6	TR β: -6.5	TR β: -3.7	TR β: -6.8	TR β: -4.3

Spojina	Sevofluran	Sibutramin	Sildenafil	Silodozin	Simeprevir	Simvastatin	Sofosbuvir	Sorbitol	Sotalol	Spironolakt on	Srebrov sulfadiazin
AR	AR : -6.2	AR : -7.3	AR : 3.1	AR : -6.5	AR : 35.2	AR : -2.9	AR : -1.8	AR : -5.2	AR : -6.7	AR : 5.1	AR : -7.4
AR an.	AR an.: -6.2	AR an.: -7.9	AR an.: 1.5	AR an.: -5.8	AR an.: 33.5	AR an.: -5.4	AR an.: -3.5	AR an.: -4.7	AR an.: -7.1	AR an.: -2.8	AR an.: -7.7
ER $\alpha$	ER $\alpha$ : -5.3	ER $\alpha$ : -8.2	ER $\alpha$ : -5.4	ER $\alpha$ : -7.2	ER $\alpha$ : -4.0	ER $\alpha$ : -6.9	ER $\alpha$ : -7.0	ER $\alpha$ : -4.7	ER $\alpha$ : -6.2	ER $\alpha$ : -6.3	ER $\alpha$ : -7.5
ER $\alpha$ an.	ER $\alpha$ an.: -5.5	ER $\alpha$ an.: -7.6	ER $\alpha$ an.: -7.2	ER $\alpha$ an.: -8.4	ER $\alpha$ an.: -7.1	ER $\alpha$ an.: -6.9	ER $\alpha$ an.: -7.9	ER $\alpha$ an.: -4.4	ER $\alpha$ an.: -6.7	ER $\alpha$ an.: -7.4	ER $\alpha$ an.: -7.5
ER $\beta$	ER $\beta$ : -5.5	ER $\beta$ : -7.9	ER $\beta$ : -1.1	ER $\beta$ : -7.3	ER $\beta$ : 29.7	ER $\beta$ : -5.0	ER $\beta$ : -3.1	ER $\beta$ : -4.7	ER $\beta$ : -6.9	ER $\beta$ : -2.0	ER $\beta$ : -7.6
ER $\beta$ an.	ER $\beta$ an.: -5.3	ER $\beta$ an.: -7.4	ER $\beta$ an.: -7.7	ER $\beta$ an.: -7.4	ER $\beta$ an.: -8.0	ER $\beta$ an.: -8.0	ER $\beta$ an.: -8.3	ER $\beta$ an.: -4.4	ER $\beta$ an.: -5.9	ER $\beta$ an.: -6.9	ER $\beta$ an.: -7.7
GR	GR: -5.3	GR: -7.0	GR: -7.0	GR: -8.7	GR: 8.2	GR: -7.5	GR: -8.5	GR: -4.8	GR: -7.2	GR: -8.2	GR: -7.0
GR an.	GR an.: -5.2	GR an.: -6.7	GR an.: -8.6	GR an.: -8.1	GR an.: -9.8	GR an.: -8.7	GR an.: -8.9	GR an.: -4.6	GR an.: -5.6	GR an.: -9.3	GR an.: -7.0
LXR $\alpha$	LXR $\alpha$ : -5.7	LXR $\alpha$ : -8.2	LXR $\alpha$ : -8.7	LXR $\alpha$ : -9.2	LXR $\alpha$ : -1.5	LXR $\alpha$ : -9.4	LXR $\alpha$ : -9.3	LXR $\alpha$ : -4.7	LXR $\alpha$ : -7.1	LXR $\alpha$ : -8.9	LXR $\alpha$ : -7.7
LXR $\beta$	LXR $\beta$ : -5.8	LXR $\beta$ : -7.7	LXR $\beta$ : -9.1	LXR $\beta$ : -9.8	LXR $\beta$ : 10.4	LXR $\beta$ : -9.5	LXR $\beta$ : -10.0	LXR $\beta$ : -4.7	LXR $\beta$ : -7.3	LXR $\beta$ : -8.1	LXR $\beta$ : -7.4
PPAR $\alpha$	PPAR $\alpha$ : -5.4	PPAR $\alpha$ : -7.4	PPAR $\alpha$ : -8.5	PPAR $\alpha$ : -9.0	PPAR $\alpha$ : -5.6	PPAR $\alpha$ : -7.4	PPAR $\alpha$ : -9.0	PPAR $\alpha$ : -4.9	PPAR $\alpha$ : -6.4	PPAR $\alpha$ : -3.6	PPAR $\alpha$ : -7.0
PPAR $\beta$	PPAR $\beta$ : -5.9	PPAR $\beta$ : -6.8	PPAR $\beta$ : -7.7	PPAR $\beta$ : -9.2	PPAR $\beta$ : -6.2	PPAR $\beta$ : -6.9	PPAR $\beta$ : -8.7	PPAR $\beta$ : -5.1	PPAR $\beta$ : -6.6	PPAR $\beta$ : -7.6	PPAR $\beta$ : -7.1
PPAR $\gamma$	PPAR $\gamma$ : -5.3	PPAR $\gamma$ : -6.3	PPAR $\gamma$ : -9.0	PPAR $\gamma$ : -9.2	PPAR $\gamma$ : -9.1	PPAR $\gamma$ : -8.0	PPAR $\gamma$ : -8.9	PPAR $\gamma$ : -4.7	PPAR $\gamma$ : -6.6	PPAR $\gamma$ : -7.1	PPAR $\gamma$ : -6.8
RXR $\alpha$	RXR $\alpha$ : -5.7	RXR $\alpha$ : -8.5	RXR $\alpha$ : -7.6	RXR $\alpha$ : -9.1	RXR $\alpha$ : 6.9	RXR $\alpha$ : -9.5	RXR $\alpha$ : -8.6	RXR $\alpha$ : -5.5	RXR $\alpha$ : -6.7	RXR $\alpha$ : -6.9	RXR $\alpha$ : -7.5
TR $\alpha$	TR $\alpha$ : -5.7	TR $\alpha$ : -7.0	TR $\alpha$ : -2.8	TR $\alpha$ : -6.7	TR $\alpha$ : 29.0	TR $\alpha$ : -4.4	TR $\alpha$ : -4.6	TR $\alpha$ : -4.9	TR $\alpha$ : -7.6	TR $\alpha$ : 3.1	TR $\alpha$ : -7.6
TR $\beta$	TR $\beta$ : -5.5	TR $\beta$ : -8.4	TR $\beta$ : -4.3	TR $\beta$ : -7.8	TR $\beta$ : 30.0	TR $\beta$ : -7.3	TR $\beta$ : -6.5	TR $\beta$ : -5.2	TR $\beta$ : -7.1	TR $\beta$ : -0.1	TR $\beta$ : -7.6

Spojina	Stavudin	Stiripentol	Stroncijev ranelat	Sufentanil	Sulfametoks azol	Sulfasalazin	Sulpirid	Sumatriptan	Sunitinib	Tafamidis	Tafluprost
AR	AR : -7.3	AR : -7.9	AR : -6.6	AR : -5.0	AR : -7.4	AR : -0.2	AR : -5.9	AR : -6.7	AR : -2.0	AR : -7.7	AR : -5.0
AR an.	AR an.: -7.1	AR an.: -7.7	AR an.: -6.6	AR an.: -5.9	AR an.: -7.6	AR an.: 2.7	AR an.: -6.8	AR an.: -6.8	AR an.: -2.6	AR an.: -6.3	AR an.: -5.6
ER $\alpha$	ER $\alpha$ : -7.0	ER $\alpha$ : -7.1	ER $\alpha$ : -6.4	ER $\alpha$ : -7.8	ER $\alpha$ : -7.4	ER $\alpha$ : -7.3	ER $\alpha$ : -7.0	ER $\alpha$ : -7.0	ER $\alpha$ : -7.1	ER $\alpha$ : -6.5	ER $\alpha$ : -8.5
ER $\alpha$ an.	ER $\alpha$ an.: -7.2	ER $\alpha$ an.: -7.0	ER $\alpha$ an.: -6.7	ER $\alpha$ an.: -8.1	ER $\alpha$ an.: -7.6	ER $\alpha$ an.: -8.3	ER $\alpha$ an.: -7.7	ER $\alpha$ an.: -6.8	ER $\alpha$ an.: -6.9	ER $\alpha$ an.: -7.6	ER $\alpha$ an.: -8.2
ER $\beta$	ER $\beta$ : -7.4	ER $\beta$ : -7.0	ER $\beta$ : -6.9	ER $\beta$ : -5.2	ER $\beta$ : -7.2	ER $\beta$ : -3.8	ER $\beta$ : -6.8	ER $\beta$ : -6.7	ER $\beta$ : -3.4	ER $\beta$ : -5.0	ER $\beta$ : -7.0
ER $\beta$ an.	ER $\beta$ an.: -7.4	ER $\beta$ an.: -6.7	ER $\beta$ an.: -6.1	ER $\beta$ an.: -6.5	ER $\beta$ an.: -7.4	ER $\beta$ an.: -7.6	ER $\beta$ an.: -7.1	ER $\beta$ an.: -6.8	ER $\beta$ an.: -7.2	ER $\beta$ an.: -7.8	ER $\beta$ an.: -7.6
GR	GR: -6.9	GR: -7.5	GR: -7.1	GR: -8.2	GR: -7.1	GR: -9.6	GR: -7.8	GR: -7.2	GR: -9.0	GR: -8.7	GR: -9.1
GR an.	GR an.: -6.3	GR an.: -6.2	GR an.: -6.1	GR an.: -7.5	GR an.: -6.9	GR an.: -8.4	GR an.: -6.8	GR an.: -7.1	GR an.: -8.8	GR an.: -7.9	GR an.: -7.1
LXR $\alpha$	LXR $\alpha$ : -7.4	LXR $\alpha$ : -8.1	LXR $\alpha$ : -6.8	LXR $\alpha$ : -7.7	LXR $\alpha$ : -7.8	LXR $\alpha$ : -10.0	LXR $\alpha$ : -8.5	LXR $\alpha$ : -7.9	LXR $\alpha$ : -10.4	LXR $\alpha$ : -9.2	LXR $\alpha$ : -9.1
LXR $\beta$	LXR $\beta$ : -7.5	LXR $\beta$ : -8.4	LXR $\beta$ : -7.2	LXR $\beta$ : -8.3	LXR $\beta$ : -7.6	LXR $\beta$ : -10.1	LXR $\beta$ : -8.5	LXR $\beta$ : -7.9	LXR $\beta$ : -10.4	LXR $\beta$ : -9.7	LXR $\beta$ : -8.9
PPAR $\alpha$	PPAR $\alpha$ : -6.7	PPAR $\alpha$ : -7.2	PPAR $\alpha$ : -6.9	PPAR $\alpha$ : -7.5	PPAR $\alpha$ : -7.0	PPAR $\alpha$ : -8.3	PPAR $\alpha$ : -7.7	PPAR $\alpha$ : -7.5	PPAR $\alpha$ : -7.9	PPAR $\alpha$ : -8.5	PPAR $\alpha$ : -8.1
PPAR $\beta$	PPAR $\beta$ : -6.8	PPAR $\beta$ : -7.5	PPAR $\beta$ : -6.6	PPAR $\beta$ : -8.1	PPAR $\beta$ : -7.1	PPAR $\beta$ : -9.4	PPAR $\beta$ : -7.9	PPAR $\beta$ : -7.3	PPAR $\beta$ : -9.2	PPAR $\beta$ : -9.3	PPAR $\beta$ : -8.8
PPAR $\gamma$	PPAR $\gamma$ : -6.5	PPAR $\gamma$ : -7.4	PPAR $\gamma$ : -6.0	PPAR $\gamma$ : -7.0	PPAR $\gamma$ : -7.2	PPAR $\gamma$ : -9.0	PPAR $\gamma$ : -7.3	PPAR $\gamma$ : -6.7	PPAR $\gamma$ : -8.3	PPAR $\gamma$ : -7.8	PPAR $\gamma$ : -8.4
RXR $\alpha$	RXR $\alpha$ : -7.4	RXR $\alpha$ : -8.4	RXR $\alpha$ : -6.9	RXR $\alpha$ : -8.8	RXR $\alpha$ : -7.7	RXR $\alpha$ : -9.1	RXR $\alpha$ : -8.1	RXR $\alpha$ : -7.3	RXR $\alpha$ : -8.8	RXR $\alpha$ : -9.5	RXR $\alpha$ : -9.6
TR $\alpha$	TR $\alpha$ : -7.2	TR $\alpha$ : -8.6	TR $\alpha$ : -6.5	TR $\alpha$ : -6.0	TR $\alpha$ : -7.3	TR $\alpha$ : -7.6	TR $\alpha$ : -7.6	TR $\alpha$ : -7.5	TR $\alpha$ : -7.9	TR $\alpha$ : -8.4	TR $\alpha$ : -6.7
TR $\beta$	TR $\beta$ : -7.3	TR $\beta$ : -8.4	TR $\beta$ : -6.8	TR $\beta$ : -7.8	TR $\beta$ : -7.6	TR $\beta$ : -8.4	TR $\beta$ : -8.5	TR $\beta$ : -7.4	TR $\beta$ : -8.8	TR $\beta$ : -9.4	TR $\beta$ : -8.2

Spojina	Tamsulozin	Tapentadol	Tavrin	Tazobaktam	Tedizolid fosfat	Tegafur	Telaprevir	Telbivudin	Temozolom id	Teofilin	Terazosin
AR	AR : -5.5	AR : -6.9	AR : -3.8	AR : -6.1	AR : 6.3	AR : -7.0	AR : 12.3	AR : -7.2	AR : -7.0	AR : -6.4	AR : 7.8
AR an.	AR an.: -6.3	AR an.: -6.7	AR an.: -3.7	AR an.: -6.7	AR an.: 10.0	AR an.: -7.2	AR an.: 12.4	AR an.: -6.8	AR an.: -6.5	AR an.: -6.4	AR an.: 8.7
ER $\alpha$	ER $\alpha$ : -7.4	ER $\alpha$ : -6.8	ER $\alpha$ : -3.5	ER $\alpha$ : -7.2	ER $\alpha$ : -7.0	ER $\alpha$ : -6.6	ER $\alpha$ : -4.9	ER $\alpha$ : -7.5	ER $\alpha$ : -5.8	ER $\alpha$ : -5.7	ER $\alpha$ : -5.7
ER $\alpha$ an.	ER $\alpha$ an.: -7.9	ER $\alpha$ an.: -6.6	ER $\alpha$ an.: -3.5	ER $\alpha$ an.: -6.8	ER $\alpha$ an.: -7.9	ER $\alpha$ an.: -6.1	ER $\alpha$ an.: -6.6	ER $\alpha$ an.: -7.4	ER $\alpha$ an.: -5.8	ER $\alpha$ an.: -5.6	ER $\alpha$ an.: -7.1
ER $\beta$	ER $\beta$ : -6.1	ER $\beta$ : -6.9	ER $\beta$ : -3.3	ER $\beta$ : -6.9	ER $\beta$ : 0.1	ER $\beta$ : -6.7	ER $\beta$ : 9.9	ER $\beta$ : -7.1	ER $\beta$ : -6.1	ER $\beta$ : -6.1	ER $\beta$ : 5.2
ER $\beta$ an.	ER $\beta$ an.: -6.6	ER $\beta$ an.: -6.9	ER $\beta$ an.: -3.5	ER $\beta$ an.: -7.0	ER $\beta$ an.: -7.7	ER $\beta$ an.: -6.3	ER $\beta$ an.: -6.7	ER $\beta$ an.: -6.9	ER $\beta$ an.: -6.0	ER $\beta$ an.: -5.7	ER $\beta$ an.: -6.7
GR	GR: -8.6	GR: -7.4	GR: -3.8	GR: -7.1	GR: -9.9	GR: -6.7	GR: -5.0	GR: -7.6	GR: -6.2	GR: -5.9	GR: -8.8
GR an.	GR an.: -7.2	GR an.: -6.1	GR an.: -3.2	GR an.: -6.1	GR an.: -8.4	GR an.: -5.8	GR an.: -9.0	GR an.: -6.3	GR an.: -5.6	GR an.: -5.4	GR an.: -8.1
LXR $\alpha$	LXR $\alpha$ : -8.7	LXR $\alpha$ : -7.2	LXR $\alpha$ : -3.6	LXR $\alpha$ : -7.1	LXR $\alpha$ : -10.4	LXR $\alpha$ : -6.8	LXR $\alpha$ : -5.5	LXR $\alpha$ : -7.5	LXR $\alpha$ : -6.4	LXR $\alpha$ : -6.1	LXR $\alpha$ : -9.7

LXR β	LXR β: -8.9	LXR β: -7.7	LXR β: -3.6	LXR β: -7.4	LXR β: -9.1	LXR β: -6.9	LXR β: -6.3	LXR β: -7.6	LXR β: -6.7	LXR β: -6.6	LXR β: -9.6
PPAR α	PPAR α: -8.3	PPAR α: -6.5	PPAR α: -3.6	PPAR α: -6.4	PPAR α: -8.5	PPAR α: -6.4	PPAR α: -6.7	PPAR α: -6.7	PPAR α: -6.0	PPAR α: -5.8	PPAR α: -6.6
PPAR β	PPAR β: -8.5	PPAR β: -6.7	PPAR β: -3.6	PPAR β: -6.2	PPAR β: -8.4	PPAR β: -6.6	PPAR β: -8.5	PPAR β: -7.2	PPAR β: -6.1	PPAR β: -6.1	PPAR β: -9.1
PPAR γ	PPAR γ: -8.3	PPAR γ: -7.0	PPAR γ: -3.5	PPAR γ: -5.3	PPAR γ: -8.4	PPAR γ: -6.4	PPAR γ: -8.1	PPAR γ: -6.4	PPAR γ: -6.1	PPAR γ: -5.8	PPAR γ: -7.9
RXR α	RXR α: -8.1	RXR α: -7.1	RXR α: -3.8	RXR α: -7.4	RXR α: -7.2	RXR α: -6.9	RXR α: -2.4	RXR α: -7.3	RXR α: -6.1	RXR α: -5.8	RXR α: -5.9
TR α	TR α: -6.8	TR α: -7.6	TR α: -3.5	TR α: -5.9	TR α: -6.1	TR α: -6.6	TR α: 5.0	TR α: -6.9	TR α: -6.2	TR α: -6.2	TR α: -5.5
TR β	TR β: -7.0	TR β: -7.7	TR β: -4.0	TR β: -6.5	TR β: -6.8	TR β: -6.6	TR β: 0.7	TR β: -7.4	TR β: -6.2	TR β: -5.8	TR β: -7.7

Spojina	Terbinafin	Teriflunomid	Terpin hidrat	Tetabenazin	Tetrazolin	Tiamazol	Tianeptin	Tibolon	Tietilperazin	Tigeciklin	Tikagrelor
AR	AR : -6.9	AR : -8.1	AR : -6.4	AR : -5.4	AR : -7.7	AR : -3.9	AR : -3.9	AR : -7.9	AR : -2.0	AR : 20.3	AR : -0.2
AR an.	AR an.: -7.1	AR an.: -8.1	AR an.: -6.5	AR an.: -7.3	AR an.: -7.7	AR an.: -4.1	AR an.: -5.2	AR an.: -8.1	AR an.: -4.6	AR an.: 10.4	AR an.: -1.9
ER α	ER α: -8.8	ER α: -8.2	ER α: -6.1	ER α: -7.9	ER α: -8.0	ER α: -4.0	ER α: -6.7	ER α: -9.1	ER α: -7.4	ER α: -4.8	ER α: -5.9
ER α an.	ER α an.: -8.7	ER α an.: -8.1	ER α an.: -6.0	ER α an.: -8.3	ER α an.: -8.0	ER α an.: -3.6	ER α an.: -7.9	ER α an.: -8.1	ER α an.: -7.8	ER α an.: -8.9	ER α an.: -7.3
ER β	ER β: -7.1	ER β: -7.5	ER β: -6.0	ER β: -5.7	ER β: -8.0	ER β: -3.9	ER β: -4.7	ER β: -8.4	ER β: -3.4	ER β: 20.4	ER β: -4.1
ER β an.	ER β an.: -8.2	ER β an.: -7.1	ER β an.: -5.8	ER β an.: -7.6	ER β an.: -7.7	ER β an.: -4.0	ER β an.: -6.4	ER β an.: -6.9	ER β an.: -7.0	ER β an.: -7.2	ER β an.: -7.2
GR	GR: -7.6	GR: -7.8	GR: -5.5	GR: -8.3	GR: -7.7	GR: -3.9	GR: -8.4	GR: -9.5	GR: -9.1	GR: -0.6	GR: -8.3
GR an.	GR an.: -7.9	GR an.: -7.5	GR an.: -5.7	GR an.: -7.9	GR an.: -6.9	GR an.: -4.0	GR an.: -7.7	GR an.: -8.4	GR an.: -7.5	GR an.: -9.8	GR an.: -8.9
LXR α	LXR α: -9.9	LXR α: -8.7	LXR α: -6.8	LXR α: -8.4	LXR α: -8.2	LXR α: -3.9	LXR α: -7.6	LXR α: -10.3	LXR α: -8.3	LXR α: -5.8	LXR α: -9.0
LXR β	LXR β: -9.9	LXR β: -8.6	LXR β: -6.8	LXR β: -8.8	LXR β: -8.3	LXR β: -3.8	LXR β: -8.8	LXR β: -11.0	LXR β: -8.6	LXR β: -7.0	LXR β: -10.2
PPAR α	PPAR α: -8.6	PPAR α: -8.3	PPAR α: -6.0	PPAR α: -6.9	PPAR α: -7.2	PPAR α: -3.7	PPAR α: -7.6	PPAR α: -6.6	PPAR α: -7.7	PPAR α: -3.7	PPAR α: -8.8
PPAR β	PPAR β: -9.1	PPAR β: -9.1	PPAR β: -6.0	PPAR β: -8.4	PPAR β: -7.2	PPAR β: -3.9	PPAR β: -7.5	PPAR β: -8.1	PPAR β: -8.4	PPAR β: -9.9	PPAR β: -9.6
PPAR γ	PPAR γ: -8.3	PPAR γ: -8.0	PPAR γ: -5.4	PPAR γ: -7.5	PPAR γ: -7.1	PPAR γ: -3.8	PPAR γ: -7.5	PPAR γ: -8.5	PPAR γ: -8.0	PPAR γ: -6.7	PPAR γ: -8.7
RXR α	RXR α: -9.1	RXR α: -9.0	RXR α: -6.3	RXR α: -8.1	RXR α: -7.7	RXR α: -3.6	RXR α: -10.5	RXR α: -9.2	RXR α: -8.6	RXR α: 4.7	RXR α: -9.5
TR α	TR α: -8.3	TR α: -9.4	TR α: -6.5	TR α: -5.4	TR α: -8.6	TR α: -3.9	TR α: -5.9	TR α: -4.3	TR α: -2.4	TR α: 6.3	TR α: -5.4
TR β	TR β: -8.4	TR β: -9.1	TR β: -6.3	TR β: -7.6	TR β: -8.7	TR β: -4.2	TR β: -7.1	TR β: -8.0	TR β: -6.7	TR β: 4.5	TR β: -7.7

Spojina	Tiklopidin	Timolol	Tioktinska kis.	Tiotepa	Tiotropij	Tirofiban	Tirozin	Tizanidin	Tobramicin	Tolkapon	Tolterodin
AR	AR : -7.6	AR : -6.7	AR : -5.5	AR : -4.5	AR : -5.3	AR : -5.9	AR : -6.7	AR : -6.8	AR : -3.2	AR : -8.1	AR : -5.9
AR an.	AR an.: -7.9	AR an.: -6.5	AR an.: -5.3	AR an.: -4.4	AR an.: -6.4	AR an.: -6.4	AR an.: -6.4	AR an.: -6.9	AR an.: -2.5	AR an.: -8.3	AR : -7.5
ER α	ER α: -8.0	ER α: -6.5	ER α: -5.2	ER α: -4.1	ER α: -6.5	ER α: -7.3	ER α: -5.9	ER α: -6.9	ER α: -4.1	ER α: -8.5	ER α: -8.8
ER α an.	ER α an.: -8.1	ER α an.: -6.3	ER α an.: -4.9	ER α an.: -4.1	ER α an.: -7.3	ER α an.: -7.4	ER α an.: -6.1	ER α an.: -6.6	ER α an.: -5.7	ER α an.: -8.3	ER α: -8.9
ER β	ER β: -7.4	ER β: -6.5	ER β: -5.5	ER β: -4.3	ER β: -5.5	ER β: -6.2	ER β: -6.3	ER β: -6.9	ER β: -1.9	ER β: -8.3	ER β: -8.6
ER β an.	ER β an.: -7.7	ER β an.: -6.2	ER β an.: -5.2	ER β an.: -4.0	ER β an.: -7.5	ER β an.: -7.0	ER β an.: -6.0	ER β an.: -6.7	ER β an.: -4.5	ER β an.: -8.0	ER β: -8.7
GR	GR: -7.6	GR: -6.5	GR: -5.6	GR: -4.3	GR: -8.2	GR: -8.2	GR: -6.6	GR: -7.1	GR: -6.2	GR: -8.2	GR: -7.8
GR an.	GR an.: -7.0	GR an.: -6.0	GR an.: -4.8	GR an.: -4.2	GR an.: -7.5	GR an.: -7.1	GR an.: -5.7	GR an.: -6.4	GR an.: -7.1	GR an.: -7.7	GR: -7.8
LXR α	LXR α: -8.3	LXR α: -7.0	LXR α: -5.6	LXR α: -4.4	LXR α: -8.5	LXR α: -8.7	LXR α: -6.3	LXR α: -7.1	LXR α: -7.5	LXR α: -9.0	LXR α: -9.0
LXR β	LXR β: -8.3	LXR β: -7.0	LXR β: -5.3	LXR β: -4.5	LXR β: -8.5	LXR β: -9.1	LXR β: -6.7	LXR β: -7.3	LXR β: -8.2	LXR β: -8.8	LXR β: -8.7
PPAR α	PPAR α: -7.3	PPAR α: -6.3	PPAR α: -5.3	PPAR α: -4.1	PPAR α: -7.2	PPAR α: -7.6	PPAR α: -6.0	PPAR α: -6.8	PPAR α: -5.7	PPAR α: -9.0	PPAR α: -8.2
PPAR β	PPAR β: -7.3	PPAR β: -6.8	PPAR β: -5.1	PPAR β: -4.6	PPAR β: -7.4	PPAR β: -8.1	PPAR β: -6.2	PPAR β: -6.7	PPAR β: -7.0	PPAR β: -8.0	PPAR β: -8.1
PPAR γ	PPAR γ: -7.7	PPAR γ: -6.6	PPAR γ: -5.4	PPAR γ: -4.1	PPAR γ: -6.4	PPAR γ: -7.8	PPAR γ: -6.2	PPAR γ: -6.6	PPAR γ: -5.2	PPAR γ: -8.4	PPAR γ: -7.2
RXR α	RXR α: -8.2	RXR α: -6.9	RXR α: -6.1	RXR α: -4.4	RXR α: -7.4	RXR α: -8.3	RXR α: -6.5	RXR α: -6.9	RXR α: -5.2	RXR α: -8.7	RXR α: -9.1
TR α	TR α: -8.2	TR α: -6.3	TR α: -5.8	TR α: -4.3	TR α: -6.3	TR α: -7.1	TR α: -6.5	TR α: -7.3	TR α: -1.7	TR α: -9.4	TR α: -7.8
TR β	TR β: -8.2	TR β: -6.9	TR β: -5.6	TR β: -4.6	TR β: -7.5	TR β: -6.9	TR β: -6.2	TR β: -7.6	TR β: -5.6	TR β: -9.2	TR β: -8.2

Spojina	Topiramam	Topotekan	Torasemid	Trabektedin	Tramadol	Trametinib	Trandolapril	Travoprost	Trazodon	Treonin	Treprostini
AR	AR : -5.8	AR : 7.0	AR : -6.5	AR : 59.4	AR : -6.8	AR : 13.0	AR : -3.2	AR : -4.4	AR : -6.2	AR : -4.4	AR : -5.3
AR an.	AR an. : -7.0	AR an. : 4.7	AR an. : -7.1	AR an. : 60.9	AR an. : -7.4	AR an. : 8.9	AR an. : -5.3	AR an. : -3.8	AR an. : -7.0	AR an. : -4.4	AR an. : -6.6
ER $\alpha$	ER $\alpha$ : -7.6	ER $\alpha$ : -5.5	ER $\alpha$ : -7.9	ER $\alpha$ : -4.5	ER $\alpha$ : -8.0	ER $\alpha$ : -4.9	ER $\alpha$ : -8.3	ER $\alpha$ : -8.4	ER $\alpha$ : -8.2	ER $\alpha$ : -4.2	ER $\alpha$ : -7.6
ER $\alpha$ an.	ER $\alpha$ an. : -6.7	ER $\alpha$ an. : -6.7	ER $\alpha$ an. : -8.5	ER $\alpha$ an. : -7.1	ER $\alpha$ an. : -7.4	ER $\alpha$ an. : -7.2	ER $\alpha$ an. : -8.1	ER $\alpha$ an. : -9.0	ER $\alpha$ an. : -8.7	ER $\alpha$ an. : -4.0	ER $\alpha$ an. : -7.5
ER $\beta$	ER $\beta$ : -6.7	ER $\beta$ : 7.2	ER $\beta$ : -7.3	ER $\beta$ : 65.2	ER $\beta$ : -7.5	ER $\beta$ : 12.2	ER $\beta$ : -6.0	ER $\beta$ : -6.6	ER $\beta$ : -8.0	ER $\beta$ : -4.1	ER $\beta$ : -6.2
ER $\beta$ an.	ER $\beta$ an. : -7.0	ER $\beta$ an. : -7.2	ER $\beta$ an. : -7.7	ER $\beta$ an. : -6.2	ER $\beta$ an. : -7.1	ER $\beta$ an. : -6.8	ER $\beta$ an. : -7.3	ER $\beta$ an. : -8.1	ER $\beta$ an. : -8.0	ER $\beta$ an. : -3.9	ER $\beta$ an. : -6.9
GR	GR : -7.6	GR : -8.5	GR : -9.0	GR : 13.0	GR : -7.0	GR : -7.0	GR : -8.6	GR : -8.7	GR : -9.2	GR : -4.7	GR : -8.8
GR an.	GR an. : -7.4	GR an. : -8.3	GR an. : -8.4	GR an. : -4.4	GR an. : -6.9	GR an. : -8.7	GR an. : -7.6	GR an. : -8.0	GR an. : -8.4	GR an. : -4.1	GR an. : -7.2
LXR $\alpha$	LXR $\alpha$ : -7.9	LXR $\alpha$ : -9.8	LXR $\alpha$ : -9.7	LXR $\alpha$ : 24.6	LXR $\alpha$ : -8.4	LXR $\alpha$ : -5.3	LXR $\alpha$ : -9.4	LXR $\alpha$ : -9.4	LXR $\alpha$ : -9.6	LXR $\alpha$ : -4.3	LXR $\alpha$ : -9.1
LXR $\beta$	LXR $\beta$ : -7.7	LXR $\beta$ : -11.9	LXR $\beta$ : -9.1	LXR $\beta$ : 13.8	LXR $\beta$ : -7.6	LXR $\beta$ : -6.5	LXR $\beta$ : -9.8	LXR $\beta$ : -9.6	LXR $\beta$ : -10.3	LXR $\beta$ : -4.1	LXR $\beta$ : -9.5
PPAR $\alpha$	PPAR $\alpha$ : -6.6	PPAR $\alpha$ : -7.9	PPAR $\alpha$ : -8.2	PPAR $\alpha$ : 10.0	PPAR $\alpha$ : -7.4	PPAR $\alpha$ : -5.9	PPAR $\alpha$ : -8.0	PPAR $\alpha$ : -8.1	PPAR $\alpha$ : -8.9	PPAR $\alpha$ : -4.4	PPAR $\alpha$ : -8.1
PPAR $\beta$	PPAR $\beta$ : -6.6	PPAR $\beta$ : -7.6	PPAR $\beta$ : -8.2	PPAR $\beta$ : 14.2	PPAR $\beta$ : -7.0	PPAR $\beta$ : -6.3	PPAR $\beta$ : -8.4	PPAR $\beta$ : -9.1	PPAR $\beta$ : -9.7	PPAR $\beta$ : -4.4	PPAR $\beta$ : -8.6
PPAR $\gamma$	PPAR $\gamma$ : -6.0	PPAR $\gamma$ : -9.3	PPAR $\gamma$ : -8.8	PPAR $\gamma$ : 1.4	PPAR $\gamma$ : -7.0	PPAR $\gamma$ : -8.7	PPAR $\gamma$ : -8.3	PPAR $\gamma$ : -8.7	PPAR $\gamma$ : -9.0	PPAR $\gamma$ : -4.2	PPAR $\gamma$ : -7.9
RXR $\alpha$	RXR $\alpha$ : -8.5	RXR $\alpha$ : -5.1	RXR $\alpha$ : -9.5	RXR $\alpha$ : 25.0	RXR $\alpha$ : -7.4	RXR $\alpha$ : -3.6	RXR $\alpha$ : -10.4	RXR $\alpha$ : -9.6	RXR $\alpha$ : -9.8	RXR $\alpha$ : -4.9	RXR $\alpha$ : -8.4
TR $\alpha$	TR $\alpha$ : -5.9	TR $\alpha$ : -4.9	TR $\alpha$ : -8.1	TR $\alpha$ : 43.7	TR $\alpha$ : -7.1	TR $\alpha$ : -1.1	TR $\alpha$ : -7.7	TR $\alpha$ : -5.8	TR $\alpha$ : -8.1	TR $\alpha$ : -4.7	TR $\alpha$ : -7.6
TR $\beta$	TR $\beta$ : -7.6	TR $\beta$ : -4.4	TR $\beta$ : -8.2	TR $\beta$ : 26.3	TR $\beta$ : -7.8	TR $\beta$ : -4.4	TR $\beta$ : -7.4	TR $\beta$ : -6.2	TR $\beta$ : -8.8	TR $\beta$ : -4.3	TR $\beta$ : -7.9

Spojina	Tretinoin	Triamcinololnacetamid	Triamcinololnheksacetamid	Trimetazidin	Trimetoprim	Triptofan	Tropikamid	Tropsij	Ulipristalacetat	Urapidil	Ursodeoksiholna kis.
AR	AR : 0.2	AR : 1.8	AR : 4.6	AR : -7.1	AR : -6.8	AR : -7.0	AR : -6.4	AR : -4.9	AR : 12.2	AR : -3.9	AR : -3.9
AR an.	AR an. : 1.5	AR an. : 0.4	AR an. : 2.5	AR an. : -6.9	AR an. : -7.6	AR an. : -6.8	AR an. : -7.0	AR an. : -4.9	AR an. : 2.3	AR an. : -5.2	AR an. : -2.4
ER $\alpha$	ER $\alpha$ : -7.5	ER $\alpha$ : -4.4	ER $\alpha$ : -5.8	ER $\alpha$ : -6.9	ER $\alpha$ : -7.5	ER $\alpha$ : -6.7	ER $\alpha$ : -8.0	ER $\alpha$ : -6.1	ER $\alpha$ : -4.9	ER $\alpha$ : -7.8	ER $\alpha$ : -5.6
ER $\alpha$ an.	ER $\alpha$ an. : -8.1	ER $\alpha$ an. : -8.0	ER $\alpha$ an. : -7.6	ER $\alpha$ an. : -6.7	ER $\alpha$ an. : -7.5	ER $\alpha$ an. : -6.4	ER $\alpha$ an. : -7.8	ER $\alpha$ an. : -7.2	ER $\alpha$ an. : -7.5	ER $\alpha$ an. : -7.4	ER $\alpha$ an. : -7.0
ER $\beta$	ER $\beta$ : -2.8	ER $\beta$ : 3.8	ER $\beta$ : 2.2	ER $\beta$ : -6.8	ER $\beta$ : -6.5	ER $\beta$ : -6.7	ER $\beta$ : -7.2	ER $\beta$ : -2.1	ER $\beta$ : 8.7	ER $\beta$ : -6.1	ER $\beta$ : -4.4
ER $\beta$ an.	ER $\beta$ an. : -7.4	ER $\beta$ an. : -5.8	ER $\beta$ an. : -7.7	ER $\beta$ an. : -6.3	ER $\beta$ an. : -6.6	ER $\beta$ an. : -6.7	ER $\beta$ an. : -7.1	ER $\beta$ an. : -8.5	ER $\beta$ an. : -6.7	ER $\beta$ an. : -7.1	ER $\beta$ an. : -5.9
GR	GR : -9.0	GR : -9.4	GR : -5.3	GR : -6.3	GR : -7.0	GR : -7.3	GR : -7.4	GR : -9.3	GR : -2.8	GR : -8.4	GR : -10.0
GR an.	GR an. : -7.3	GR an. : -8.8	GR an. : -9.6	GR an. : -5.6	GR an. : -6.5	GR an. : -6.2	GR an. : -7.1	GR an. : -9.6	GR an. : -8.4	GR an. : -7.8	GR an. : -8.4
LXR $\alpha$	LXR $\alpha$ : -10.0	LXR $\alpha$ : -5.5	LXR $\alpha$ : -8.3	LXR $\alpha$ : -6.9	LXR $\alpha$ : -8.1	LXR $\alpha$ : -7.7	LXR $\alpha$ : -8.3	LXR $\alpha$ : -11.7	LXR $\alpha$ : -6.1	LXR $\alpha$ : -9.3	LXR $\alpha$ : -8.8
LXR $\beta$	LXR $\beta$ : -10.2	LXR $\beta$ : -9.8	LXR $\beta$ : -12.3	LXR $\beta$ : -7.0	LXR $\beta$ : -7.8	LXR $\beta$ : -7.6	LXR $\beta$ : -8.5	LXR $\beta$ : -10.5	LXR $\beta$ : -5.1	LXR $\beta$ : -9.7	LXR $\beta$ : -11.7
PPAR $\alpha$	PPAR $\alpha$ : -8.1	PPAR $\alpha$ : -3.4	PPAR $\alpha$ : -5.2	PPAR $\alpha$ : -6.7	PPAR $\alpha$ : -7.2	PPAR $\alpha$ : -6.6	PPAR $\alpha$ : -7.2	PPAR $\alpha$ : -8.1	PPAR $\alpha$ : -4.3	PPAR $\alpha$ : -8.5	PPAR $\alpha$ : -4.2
PPAR $\beta$	PPAR $\beta$ : -8.2	PPAR $\beta$ : -6.9	PPAR $\beta$ : -6.8	PPAR $\beta$ : -6.2	PPAR $\beta$ : -6.9	PPAR $\beta$ : -6.9	PPAR $\beta$ : -6.6	PPAR $\beta$ : -8.4	PPAR $\beta$ : -6.1	PPAR $\beta$ : -8.4	PPAR $\beta$ : -7.9
PPAR $\gamma$	PPAR $\gamma$ : -8.1	PPAR $\gamma$ : -6.5	PPAR $\gamma$ : -6.3	PPAR $\gamma$ : -5.6	PPAR $\gamma$ : -6.4	PPAR $\gamma$ : -7.7	PPAR $\gamma$ : -7.4	PPAR $\gamma$ : -8.7	PPAR $\gamma$ : -7.7	PPAR $\gamma$ : -8.0	PPAR $\gamma$ : -6.9
RXR $\alpha$	RXR $\alpha$ : -8.9	RXR $\alpha$ : -5.2	RXR $\alpha$ : -7.2	RXR $\alpha$ : -6.6	RXR $\alpha$ : -6.8	RXR $\alpha$ : -7.3	RXR $\alpha$ : -7.7	RXR $\alpha$ : -8.1	RXR $\alpha$ : -3.6	RXR $\alpha$ : -8.3	RXR $\alpha$ : -5.4
TR $\alpha$	TR $\alpha$ : -9.8	TR $\alpha$ : -2.4	TR $\alpha$ : 2.9	TR $\alpha$ : -6.4	TR $\alpha$ : -7.8	TR $\alpha$ : -7.7	TR $\alpha$ : -8.1	TR $\alpha$ : -5.4	TR $\alpha$ : 14.4	TR $\alpha$ : -7.0	TR $\alpha$ : -6.1
TR $\beta$	TR $\beta$ : -9.5	TR $\beta$ : -5.3	TR $\beta$ : -1.0	TR $\beta$ : -6.9	TR $\beta$ : -7.9	TR $\beta$ : -7.4	TR $\beta$ : -8.0	TR $\beta$ : -8.4	TR $\beta$ : 5.4	TR $\beta$ : -7.4	TR $\beta$ : -7.5

Spojina	Valaciklovir	Valganciklovir	Valin	Valprojska kislina	Valsartan	Vandetamid	Vardenafil	Vareniklin	Vekuronij	Vemurafenib	Venlafaksin
AR	AR : -7.0	AR : -6.6	AR : -4.7	AR : -5.5	AR : -2.1	AR : 1.3	AR : 4.4	AR : -8.0	AR : 25.9	AR : 0.7	AR : -6.6
AR an.	AR an. : -7.1	AR an. : -6.7	AR an. : -4.9	AR an. : -5.3	AR an. : -3.0	AR an. : -3.4	AR an. : 2.5	AR an. : -7.9	AR an. : 28.2	AR an. : -2.9	AR an. : -7.4
ER $\alpha$	ER $\alpha$ : -6.9	ER $\alpha$ : -6.6	ER $\alpha$ : -4.3	ER $\alpha$ : -4.9	ER $\alpha$ : -5.1	ER $\alpha$ : -5.8	ER $\alpha$ : -5.3	ER $\alpha$ : -7.4	ER $\alpha$ : -5.1	ER $\alpha$ : -7.9	ER $\alpha$ : -7.7
ER $\alpha$ an.	ER $\alpha$ an. : -6.9	ER $\alpha$ an. : -6.6	ER $\alpha$ an. : -4.3	ER $\alpha$ an. : -4.7	ER $\alpha$ an. : -9.0	ER $\alpha$ an. : -8.1	ER $\alpha$ an. : -7.4	ER $\alpha$ an. : -8.0	ER $\alpha$ an. : -4.6	ER $\alpha$ an. : -8.0	ER $\alpha$ an. : -7.2
ER $\beta$	ER $\beta$ : -7.0	ER $\beta$ : -6.9	ER $\beta$ : -4.4	ER $\beta$ : -4.9	ER $\beta$ : -0.5	ER $\beta$ : -3.2	ER $\beta$ : 1.8	ER $\beta$ : -7.9	ER $\beta$ : 21.3	ER $\beta$ : -2.4	ER $\beta$ : -7.3
ER $\beta$ an.	ER $\beta$ an. : -7.1	ER $\beta$ an. : -6.9	ER $\beta$ an. : -4.3	ER $\beta$ an. : -4.7	ER $\beta$ an. : -8.3	ER $\beta$ an. : -7.6	ER $\beta$ an. : -7.7	ER $\beta$ an. : -7.7	ER $\beta$ an. : -7.7	ER $\beta$ an. : -8.8	ER $\beta$ an. : -7.0
GR	GR : -6.8	GR : -7.3	GR : -4.7	GR : -5.1	GR : -8.9	GR : -9.7	GR : -7.3	GR : -7.2	GR : -1.0	GR : -8.9	GR : -7.0
GR an.	GR an. : -6.2	GR an. : -6.4	GR an. : -4.2	GR an. : -4.7	GR an. : -7.9	GR an. : -8.4	GR an. : -8.9	GR an. : -6.8	GR an. : -8.8	GR an. : -9.4	GR an. : -6.1
LXR $\alpha$	LXR $\alpha$ : -7.7	LXR $\alpha$ : -7.8	LXR $\alpha$ : -4.5	LXR $\alpha$ : -5.2	LXR $\alpha$ : -9.8	LXR $\alpha$ : -10.2	LXR $\alpha$ : -8.8	LXR $\alpha$ : -8.6	LXR $\alpha$ : -3.2	LXR $\alpha$ : -11.5	LXR $\alpha$ : -8.2

LXR β	LXR β: -7.3	LXR β: -7.5	LXR β: -4.4	LXR β: -5.2	LXR β: -10.4	LXR β: -10.2	LXR β: -9.5	LXR β: -8.6	LXR β: -7.7	LXR β: -10.5	LXR β: -8.4
PPAR α	PPAR α: -6.8	PPAR α: -7.0	PPAR α: -4.2	PPAR α: -4.8	PPAR α: -6.9	PPAR α: -9.4	PPAR α: -8.8	PPAR α: -8.0	PPAR α: -2.4	PPAR α: -9.0	PPAR α: -7.0
PPAR β	PPAR β: -7.3	PPAR β: -7.6	PPAR β: -4.1	PPAR β: -5.4	PPAR β: -9.1	PPAR β: -9.0	PPAR β: -7.9	PPAR β: -7.7	PPAR β: -3.4	PPAR β: -9.7	PPAR β: -6.9
PPAR γ	PPAR γ: -7.2	PPAR γ: -7.2	PPAR γ: -4.5	PPAR γ: -5.2	PPAR γ: -8.8	PPAR γ: -9.2	PPAR γ: -9.2	PPAR γ: -6.8	PPAR γ: -6.5	PPAR γ: -8.5	PPAR γ: -7.5
RXR α	RXR α: -8.2	RXR α: -8.4	RXR α: -4.9	RXR α: -5.3	RXR α: -9.3	RXR α: -9.7	RXR α: -7.8	RXR α: -7.8	RXR α: 6.1	RXR α: -12.0	RXR α: -7.5
TR α	TR α: -6.9	TR α: -7.4	TR α: -4.3	TR α: -5.3	TR α: -5.1	TR α: -7.5	TR α: -2.9	TR α: -7.9	TR α: 11.1	TR α: -4.1	TR α: -7.5
TR β	TR β: -7.8	TR β: -7.5	TR β: -4.2	TR β: -5.3	TR β: -7.2	TR β: -9.1	TR β: -4.6	TR β: -7.9	TR β: 4.4	TR β: -6.9	TR β: -7.8

Spojina	Verapamil	Vernakalant	Verteporfin	Vigabatrin	Vilanterol	Vildagliptin	Vinorelbin	Vismodegib	Zanamivir	Ziprazidon	Zofenopril
AR	AR : -2.2	AR : -6.7	AR : 34.1	AR : -5.1	AR : -5.2	AR : -8.2	AR : 54.1	AR : -0.4	AR : -4.8	AR : 0.3	AR : -3.5
AR an.	AR an.: -4.8	AR an.: -7.5	AR an.: 27.4	AR an.: -5.2	AR an.: -5.6	AR an.: -8.5	AR an.: 59.2	AR an.: -5.7	AR an.: -6.1	AR an.: -4.4	AR an.: -6.8
ER α	ER α: -7.9	ER α: -7.2	ER α: -4.0	ER α: -4.6	ER α: -7.4	ER α: -7.9	ER α: -3.5	ER α: -7.4	ER α: -6.6	ER α: -8.6	ER α: -8.6
ER α an.	ER α an.: -7.7	ER α an.: -7.5	ER α an.: -4.9	ER α an.: -4.7	ER α an.: -7.7	ER α an.: -8.0	ER α an.: -4.7	ER α an.: -6.9	ER α an.: -6.4	ER α an.: -9.0	ER α an.: -8.6
ER β	ER β: -3.8	ER β: -6.5	ER β: 23.7	ER β: -4.7	ER β: -6.6	ER β: -7.5	ER β: 48.3	ER β: -6.2	ER β: -5.4	ER β: -5.3	ER β: -6.6
ER β an.	ER β an.: -7.4	ER β an.: -7.0	ER β an.: -6.7	ER β an.: -4.8	ER β an.: -7.3	ER β an.: -8.0	ER β an.: -6.9	ER β an.: -7.3	ER β an.: -5.8	ER β an.: -8.3	ER β an.: -7.4
GR	GR: -7.6	GR: -8.2	GR: 5.0	GR: -4.9	GR: -7.8	GR: -7.8	GR: 13.6	GR: -9.9	GR: -6.8	GR: -10.6	GR: -9.3
GR an.	GR an.: -7.5	GR an.: -7.5	GR an.: -3.4	GR an.: -4.4	GR an.: -7.2	GR an.: -7.3	GR an.: -6.4	GR an.: -9.0	GR an.: -6.1	GR an.: -9.2	GR an.: -8.3
LXR α	LXR α: -8.5	LXR α: -9.0	LXR α: -1.9	LXR α: -4.7	LXR α: -8.7	LXR α: -8.8	LXR α: -0.4	LXR α: -10.6	LXR α: -5.3	LXR α: -11.4	LXR α: -10.4
LXR β	LXR β: -9.0	LXR β: -8.9	LXR β: 10.0	LXR β: -4.7	LXR β: -9.2	LXR β: -9.1	LXR β: 10.2	LXR β: -10.6	LXR β: -6.0	LXR β: -11.3	LXR β: -10.2
PPAR α	PPAR α: -8.0	PPAR α: -7.5	PPAR α: 13.2	PPAR α: -4.6	PPAR α: -7.9	PPAR α: -7.1	PPAR α: 8.9	PPAR α: -7.7	PPAR α: -7.1	PPAR α: -8.7	PPAR α: -8.1
PPAR β	PPAR β: -8.0	PPAR β: -8.3	PPAR β: -4.2	PPAR β: -4.7	PPAR β: -8.1	PPAR β: -7.8	PPAR β: -0.3	PPAR β: -8.9	PPAR β: -5.8	PPAR β: -9.5	PPAR β: -9.9
PPAR γ	PPAR γ: -7.9	PPAR γ: -7.8	PPAR γ: 2.2	PPAR γ: -4.9	PPAR γ: -7.7	PPAR γ: -7.1	PPAR γ: -3.6	PPAR γ: -8.3	PPAR γ: -5.2	PPAR γ: -9.2	PPAR γ: -8.9
RXR α	RXR α: -7.7	RXR α: -8.7	RXR α: 9.3	RXR α: -5.1	RXR α: -9.0	RXR α: -8.4	RXR α: 13.5	RXR α: -10.1	RXR α: -6.2	RXR α: -9.2	RXR α: -10.2
TR α	TR α: -6.9	TR α: -7.4	TR α: 30.9	TR α: -4.9	TR α: -7.6	TR α: -8.5	TR α: 40.2	TR α: -4.5	TR α: -5.8	TR α: -7.2	TR α: -7.8
TR β	TR β: -7.3	TR β: -8.6	TR β: 23.4	TR β: -4.8	TR β: -7.3	TR β: -8.8	TR β: 32.7	TR β: -9.4	TR β: -6.6	TR β: -9.6	TR β: -8.2

Spojina	Zoledronska kislina	Zolmitriptan	Zolpidem	Zonisamid	Zuklopentik sol	Zuklopentik sol dekanooat	Zuklopentik solijev acetat	2,4- diklorobenzi lalkohol	4- aminobenzo jska kis.	4- aminosalicil na kislina	5- aminolevuli nska kis.
AR	AR : -6.0	AR : -7.7	AR : -6.0	AR : -6.7	AR : -3.6	AR : -2.5	AR : -0.4	AR : -5.9	AR : -5.7	AR : -6.0	AR : -4.3
AR an.	AR an.: -5.6	AR an.: -7.3	AR an.: -7.2	AR an.: -6.3	AR an.: -4.1	AR an.: -3.9	AR an.: -1.7	AR an.: -6.1	AR an.: -5.9	AR an.: -6.1	AR an.: -4.4
ER α	ER α: -5.6	ER α: -8.3	ER α: -7.9	ER α: -6.3	ER α: -7.1	ER α: -7.3	ER α: -7.6	ER α: -5.8	ER α: -5.6	ER α: -5.8	ER α: -4.8
ER α an.	ER α an.: -5.1	ER α an.: -7.8	ER α an.: -8.4	ER α an.: -6.1	ER α an.: -8.3	ER α an.: -8.3	ER α an.: -8.7	ER α an.: -5.6	ER α an.: -5.6	ER α an.: -5.9	ER α an.: -4.2
ER β	ER β: -5.5	ER β: -7.7	ER β: -6.3	ER β: -6.5	ER β: -4.2	ER β: -2.7	ER β: -2.4	ER β: -5.7	ER β: -5.6	ER β: -5.8	ER β: -4.1
ER β an.	ER β an.: -5.0	ER β an.: -8.1	ER β an.: -7.2	ER β an.: -6.1	ER β an.: -8.3	ER β an.: -8.1	ER β an.: -8.1	ER β an.: -5.8	ER β an.: -5.6	ER β an.: -5.9	ER β an.: -4.4
GR	GR: -5.5	GR: -8.2	GR: -8.7	GR: -7.1	GR: -9.4	GR: -8.6	GR: -9.2	GR: -5.6	GR: -5.5	GR: -5.7	GR: -4.4
GR an.	GR an.: -4.9	GR an.: -7.9	GR an.: -8.1	GR an.: -6.2	GR an.: -9.0	GR an.: -8.7	GR an.: -8.9	GR an.: -5.6	GR an.: -5.3	GR an.: -5.6	GR an.: -4.1
LXR α	LXR α: -5.6	LXR α: -9.2	LXR α: -10.2	LXR α: -7.0	LXR α: -9.1	LXR α: -8.6	LXR α: -9.0	LXR α: -6.0	LXR α: -5.5	LXR α: -5.8	LXR α: -4.5
LXR β	LXR β: -5.9	LXR β: -9.5	LXR β: -9.4	LXR β: -7.0	LXR β: -9.3	LXR β: -9.3	LXR β: -9.6	LXR β: -6.3	LXR β: -6.0	LXR β: -6.2	LXR β: -4.3
PPAR α	PPAR α: -6.2	PPAR α: -8.1	PPAR α: -7.5	PPAR α: -6.7	PPAR α: -8.0	PPAR α: -8.6	PPAR α: -8.0	PPAR α: -5.6	PPAR α: -5.5	PPAR α: -5.5	PPAR α: -4.2
PPAR β	PPAR β: -6.1	PPAR β: -8.2	PPAR β: -7.0	PPAR β: -6.4	PPAR β: -8.3	PPAR β: -8.8	PPAR β: -8.5	PPAR β: -6.0	PPAR β: -5.8	PPAR β: -5.7	PPAR β: -4.6
PPAR γ	PPAR γ: -5.4	PPAR γ: -7.6	PPAR γ: -8.9	PPAR γ: -7.2	PPAR γ: -8.6	PPAR γ: -9.5	PPAR γ: -8.7	PPAR γ: -5.7	PPAR γ: -5.4	PPAR γ: -5.5	PPAR γ: -4.2
RXR α	RXR α: -5.1	RXR α: -9.3	RXR α: -8.7	RXR α: -6.6	RXR α: -9.2	RXR α: -9.1	RXR α: -9.4	RXR α: -6.0	RXR α: -6.3	RXR α: -6.1	RXR α: -4.8
TR α	TR α: -4.9	TR α: -8.4	TR α: -7.8	TR α: -6.4	TR α: -2.2	TR α: -1.6	TR α: -2.6	TR α: -5.8	TR α: -5.8	TR α: -5.9	TR α: -4.7
TR β	TR β: -5.4	TR β: -8.9	TR β: -8.7	TR β: -6.5	TR β: -5.6	TR β: -4.1	TR β: -5.8	TR β: -5.8	TR β: -5.7	TR β: -5.7	TR β: -4.7

Spojina	[18F]fludeo ksigluksa	(18F) fluorodopa
AR	AR: -5.8	AR: -7.0
AR an.	AR an.: -5.8	AR an.: -6.6
ER $\alpha$	ER $\alpha$ : -5.6	ER $\alpha$ : -6.3
ER $\alpha$ an.	ER $\alpha$ an.: -5.4	ER $\alpha$ an.: -6.5
ER $\beta$	ER $\beta$ : -5.4	ER $\beta$ : -6.4
ER $\beta$ an.	ER $\beta$ an.: -5.2	ER $\beta$ an.: -6.3
GR	GR: -5.6	GR: -7.1
GR an.	GR an.: -5.0	GR an.: -6.4
LXR $\alpha$	LXR $\alpha$ : -5.5	LXR $\alpha$ : -6.9
LXR $\beta$	LXR $\beta$ : -5.9	LXR $\beta$ : -6.9
PPAR $\alpha$	PPAR $\alpha$ : -5.5	PPAR $\alpha$ : -6.4
PPAR $\beta$	PPAR $\beta$ : -5.6	PPAR $\beta$ : -6.7
PPAR $\gamma$	PPAR $\gamma$ : -5.5	PPAR $\gamma$ : -6.5
RXR $\alpha$	RXR $\alpha$ : -5.3	RXR $\alpha$ : -7.0
TR $\alpha$	TR $\alpha$ : -6.3	TR $\alpha$ : -6.7
TR $\beta$	TR $\beta$ : -5.3	TR $\beta$ : -6.9



## Priloga 2:

**Preglednica VI: Pridobljeni rezultati vezave (vezalna energija) zdravilnih učinkovin, za katere računalniški program Endocrine Disruptome napoveduje vezavo, razvrščeno v razred »rdeč« vsaj za en receptor. Preglednica je sestavljena po njihovi ATC klasifikaciji. V desnem kotu je označeno ali obstajajo podatki o vezavi določene zdravilne učinkovine na ta jedrni receptor; PC-PubChem, DB-DrugBank, CH-ChEMBL, številka označuje članek (referenca pod to številko); + pravilno napoveduje, - nepravilno napoveduje; če zraven ni oznake, pomeni, da nismo našli podatkov v podatkovnih bazah in strokovnih člankih.**

Spojina	Glibenklamid	Glikvidon	Glimepirid	Glipizid	Domperidon	Tropisetron	Palonosetron	Aprepitant
AR	AR : -2.6 PC+	AR : 1.1 PC+	AR : -2.9 PC+	AR : -3.3 PC+	AR : -4.3	AR : -9.1 PC-	AR : -10.0	AR : 4.5
AR an.	AR an.: -5.3 PC+	AR an.: -0.5 PC+	AR an.: -2.9 PC+	AR an.: -4.7 PC+	AR an.: -6.2	AR an.: -8.7 PC-	AR an.: -9.3	AR an.: 0.9
ER $\alpha$	ER $\alpha$ : -9.1 PC-	ER $\alpha$ : -8.7 PC-	ER $\alpha$ : -9.0 PC-	ER $\alpha$ : -9.4 PC-	ER $\alpha$ : -9.4 PC-	ER $\alpha$ : -8.8	ER $\alpha$ : -8.6 PC-	ER $\alpha$ : -6.0
ER $\alpha$ an.	ER $\alpha$ an.: -9.9 PC-	ER $\alpha$ an.: -10.0 PC-	ER $\alpha$ an.: -10.0 PC-	ER $\alpha$ an.: -9.4 PC-	ER $\alpha$ an.: -10.1	ER $\alpha$ an.: -8.9 PC-	ER $\alpha$ an.: -9.1	ER $\alpha$ an.: -11.0
ER $\beta$	ER $\beta$ : -6.3	ER $\beta$ : -0.8	ER $\beta$ : -3.7	ER $\beta$ : -5.4	ER $\beta$ : -6.9	ER $\beta$ : -8.3	ER $\beta$ : -8.7	ER $\beta$ : 1.5
ER $\beta$ an.	ER $\beta$ an.: -8.8	ER $\beta$ an.: -9.9	ER $\beta$ an.: -9.0	ER $\beta$ an.: -8.9	ER $\beta$ an.: -8.7	ER $\beta$ an.: -8.8	ER $\beta$ an.: -8.8	ER $\beta$ an.: -9.0
GR	GR: -9.4 PC-	GR: -9.2 PC-	GR: -9.1 PC-	GR: -10.5 PC-	GR: -10.5	GR: -8.6 PC-	GR: -9.4	GR: -10.2
GR an.	GR an.: -9.4 PC-	GR an.: -9.9 PC-	GR an.: -9.8 PC-	GR an.: -9.2 PC-	GR an.: -9.3	GR an.: -8.2 PC-	GR an.: -9.5	GR an.: -10.3
LXR $\alpha$	LXR $\alpha$ : -10.3	LXR $\alpha$ : -11.2	LXR $\alpha$ : -10.9	LXR $\alpha$ : -10.2	LXR $\alpha$ : -11.0	LXR $\alpha$ : -9.5	LXR $\alpha$ : -10.5	LXR $\alpha$ : -10.2
LXR $\beta$	LXR $\beta$ : -11.4	LXR $\beta$ : -10.3	LXR $\beta$ : -10.6	LXR $\beta$ : -10.1	LXR $\beta$ : -11.2	LXR $\beta$ : -9.9	LXR $\beta$ : -11.2	LXR $\beta$ : -12.2
PPAR $\alpha$	PPAR $\alpha$ : -10.0	PPAR $\alpha$ : -10.0	PPAR $\alpha$ : -10.6	PPAR $\alpha$ : -10.0	PPAR $\alpha$ : -10.0	PPAR $\alpha$ : -7.9	PPAR $\alpha$ : -8.5	PPAR $\alpha$ : -9.8
PPAR $\beta$	PPAR $\beta$ : -9.9 PC-	PPAR $\beta$ : -10.6 PC-	PPAR $\beta$ : -9.4 PC+	PPAR $\beta$ : -9.4 PC+	PPAR $\beta$ : -10.6	PPAR $\beta$ : -8.5 PC+	PPAR $\beta$ : -8.9	PPAR $\beta$ : -10.1
PPAR $\gamma$	PPAR $\gamma$ : -9.3 130+,PC+	PPAR $\gamma$ : -10.0 133+,PC+	PPAR $\gamma$ : -10.2 131+	PPAR $\gamma$ : -9.2 DB+,PC-	PPAR $\gamma$ : -10.0	PPAR $\gamma$ : -8.6 PC+	PPAR $\gamma$ : -8.4	PPAR $\gamma$ : -11.5
RXR $\alpha$	RXR $\alpha$ : -9.1 PC+	RXR $\alpha$ : -8.3 PC+	RXR $\alpha$ : -10.1 PC-	RXR $\alpha$ : -9.3 PC+	RXR $\alpha$ : -10.7	RXR $\alpha$ : -8.9 PC+	RXR $\alpha$ : -9.4	RXR $\alpha$ : -7.5
TR $\alpha$	TR $\alpha$ : -6.8	TR $\alpha$ : -1.5	TR $\alpha$ : -2.1	TR $\alpha$ : -5.8	TR $\alpha$ : -7.4	TR $\alpha$ : -8.7	TR $\alpha$ : -9.3	TR $\alpha$ : 0.7
TR $\beta$	TR $\beta$ : -8.0 PC-	TR $\beta$ : -3.0 PC+	TR $\beta$ : -6.2 PC+	TR $\beta$ : -8.2 PC-	TR $\beta$ : -9.2	TR $\beta$ : -8.7 PC-	TR $\beta$ : -10.5	TR $\beta$ : -5.4
ATC	A10BB01	A10BB08	A10BB12	A10BB07	A03FA03	A04AA03	A04AA05 A04AA55	A04AD12

Spojina	Fosaprepitant	Sitagliptin	Kanaglifozin	Levonorgestrel	Nitizinin	Varfarin	Apiksaban	Eltrombopag
AR	AR : 12.1	AR : -8.2	AR : 7.3	AR : -8.7 CH+,DB+,PC+	AR : -8.0	AR : -5.5 PC+	AR : 20.6	AR : 5.4
AR an.	AR an.: 6.5	AR an.: -8.4	AR an.: -1.4	AR an.: -8.8 CH+, PC+	AR an.: -8.9	AR an.: -8.6 PC-	AR an.: 17.8	AR an.: 1.4
ER $\alpha$	ER $\alpha$ : -7.5	ER $\alpha$ : -9.5	ER $\alpha$ : -6.8	ER $\alpha$ : -8.7 136-,PC+	ER $\alpha$ : -8.4	ER $\alpha$ : -8.7 PC-	ER $\alpha$ : -6.1	ER $\alpha$ : -8.2
ER $\alpha$ an.	ER $\alpha$ an.: -9.9	ER $\alpha$ an.: -8.2	ER $\alpha$ an.: -8.2	ER $\alpha$ an.: -8.3 136+,PC+	ER $\alpha$ an.: -8.5	ER $\alpha$ an.: -9.4 PC-	ER $\alpha$ an.: -8.4	ER $\alpha$ an.: -9.9
ER $\beta$	ER $\beta$ : 4.2	ER $\beta$ : -8.7	ER $\beta$ : 1.0	ER $\beta$ : -6.9 136+	ER $\beta$ : -8.0	ER $\beta$ : -8.1	ER $\beta$ : 11.0	ER $\beta$ : 3.3
ER $\beta$ an.	ER $\beta$ an.: -9.9	ER $\beta$ an.: -8.1	ER $\beta$ an.: -7.5	ER $\beta$ an.: -7.2 136+	ER $\beta$ an.: -8.4	ER $\beta$ an.: -8.9	ER $\beta$ an.: -8.1	ER $\beta$ an.: -9.1
GR	GR: -9.5	GR: -9.6	GR: -10.0	GR: -8.9 136+,CH+	GR: -8.3	GR: -8.2 138-,PC-	GR: -5.5	GR: -10.4
GR an.	GR an.: -10.9	GR an.: -8.5	GR an.: -9.1	GR an.: -8.4 CH-,PC-	GR an.: -7.3	GR an.: -8.0 138-, PC-	GR an.: -9.0	GR an.: -10.4
LXR $\alpha$	LXR $\alpha$ : -7.5	LXR $\alpha$ : -10.3	LXR $\alpha$ : -10.3	LXR $\alpha$ : -9.3	LXR $\alpha$ : -9.3	LXR $\alpha$ : -9.2	LXR $\alpha$ : -7.9	LXR $\alpha$ : -12.4
LXR $\beta$	LXR $\beta$ : -11.1	LXR $\beta$ : -10.8	LXR $\beta$ : -11.1	LXR $\beta$ : -10.3	LXR $\beta$ : -9.3	LXR $\beta$ : -8.7	LXR $\beta$ : -8.6	LXR $\beta$ : -12.3
PPAR $\alpha$	PPAR $\alpha$ : -9.1	PPAR $\alpha$ : -8.7	PPAR $\alpha$ : -8.7	PPAR $\alpha$ : -6.9	PPAR $\alpha$ : -7.8	PPAR $\alpha$ : -7.7 PC+	PPAR $\alpha$ : -9.7	PPAR $\alpha$ : -10.3
PPAR $\beta$	PPAR $\beta$ : -10.5	PPAR $\beta$ : -9.2	PPAR $\beta$ : -11.1	PPAR $\beta$ : -7.7 PC+	PPAR $\beta$ : -8.3	PPAR $\beta$ : -8.4 PC+	PPAR $\beta$ : -9.1	PPAR $\beta$ : -10.2
PPAR $\gamma$	PPAR $\gamma$ : -10.6	PPAR $\gamma$ : -9.1	PPAR $\gamma$ : -9.1	PPAR $\gamma$ : -6.9 PC+	PPAR $\gamma$ : -8.7	PPAR $\gamma$ : -8.0 PC-	PPAR $\gamma$ : -10.6	PPAR $\gamma$ : -10.2

RXR $\alpha$	RXR $\alpha$ : -5.3	RXR $\alpha$ : -10.2	RXR $\alpha$ : -9.4	RXR $\alpha$ : -8.7 PC+	RXR $\alpha$ : -9.1	RXR $\alpha$ : -9.0 PC+	RXR $\alpha$ : -4.4	RXR $\alpha$ : -10.9
TR $\alpha$	TR $\alpha$ : 3.6	TR $\alpha$ : -8.1	TR $\alpha$ : -5.2	TR $\alpha$ : -5.2	TR $\alpha$ : -8.6	TR $\alpha$ : -9.3	TR $\alpha$ : 10.3	TR $\alpha$ : -0.8
TR $\beta$	TR $\beta$ : -0.7	TR $\beta$ : -10.2	TR $\beta$ : -8.9	TR $\beta$ : -7.3 PC+	TR $\beta$ : -8.3	TR $\beta$ : -9.5 PC-	TR $\beta$ : 1.1	TR $\beta$ : -6.0
ATC		A10BH01	A10BX11	A14AA07	A16AX04	B01AA03	B01AF02	B02BX05

Spojina	Indapamid	Drospirenon	Nebivolol	Irbesartan	Kandesartan	Telmisartan	Ezetimib	Ketokonazol
AR	AR : -7.2 PC+	AR : -6.0 141+,PC-	AR : -8.2 143-	AR : 1.5 PC+	AR : 1.2 PC+	AR : 8.7 PC+	AR : -2.2 PC+	AR : -1.6
AR an.	AR an.: -7.3 PC+	AR an.: -5.0 DB+,PC+,141+	AR an.: -8.7 143-	AR an.: -1.2 PC+	AR an.: -0.2 PC+	AR an.: 4.8 PC+	AR an.: -5.1 PC+	AR an.: 0.7 150-
ER $\alpha$	ER $\alpha$ : -9.2 PC-	ER $\alpha$ : -5.9 141+,PC+	ER $\alpha$ : -9.5 143+	ER $\alpha$ : -5.2 PC+	ER $\alpha$ : -5.3 PC-	ER $\alpha$ : -7.4 PC+	ER $\alpha$ : -10.5 PC-	ER $\alpha$ : -9.5 151-,PC-
ER $\alpha$ an.	ER $\alpha$ an.: -9.5 PC-	ER $\alpha$ an.: -8.1 141+,PC+	ER $\alpha$ an.: -9.5 143+	ER $\alpha$ an.: -10.0 PC-	ER $\alpha$ an.: -10.3 PC+	ER $\alpha$ an.: -10.0 PC-	ER $\alpha$ an.: -9.8 PC-	ER $\alpha$ an.: -9.9 151-,PC+
ER $\beta$	ER $\beta$ : -7.7	ER $\beta$ : 1.6 141+	ER $\beta$ : -7.8 143-	ER $\beta$ : 1.0	ER $\beta$ : 4.8	ER $\beta$ : 9.1	ER $\beta$ : -6.8	ER $\beta$ : -1.6
ER $\beta$ an.	ER $\beta$ an.: -6.5	ER $\beta$ an.: -7.0 141+	ER $\beta$ an.: -8.8 143+	ER $\beta$ an.: -9.4	ER $\beta$ an.: -9.6	ER $\beta$ an.: -10.1	ER $\beta$ an.: -9.7	ER $\beta$ an.: -9.3 151+
GR	GR: -8.9 PC-	GR: -9.7 CH+,141-,PC-	GR: -9.7 CH+,143-	GR: -9.2 PC-	GR: -9.1	GR: -5.6 PC+	GR: -9.0 PC-	GR: -8.9
GR an.	GR an.: -7.7 PC-	GR an.: -9.3 CH+,141-,PC+	GR an.: -8.6 CH+,143-	GR an.: -9.3 PC-	GR an.: -9.6	GR an.: -10.0 PC-	GR an.: -9.7 PC-	GR an.: -9.5 152+,116+
LXR $\alpha$	LXR $\alpha$ : -9.2	LXR $\alpha$ : -9.5	LXR $\alpha$ : -10.6	LXR $\alpha$ : -10.2	LXR $\alpha$ : -10.0	LXR $\alpha$ : -11.0	LXR $\alpha$ : -9.5	LXR $\alpha$ : -10.9
LXR $\beta$	LXR $\beta$ : -9.5	LXR $\beta$ : -12.4	LXR $\beta$ : -11.0	LXR $\beta$ : -11.6	LXR $\beta$ : -10.8	LXR $\beta$ : -11.1	LXR $\beta$ : -10.9	LXR $\beta$ : -10.1
PPAR $\alpha$	PPAR $\alpha$ : -7.7	PPAR $\alpha$ : -4.0	PPAR $\alpha$ : -9.8	PPAR $\alpha$ : -8.8	PPAR $\alpha$ : -8.0	PPAR $\alpha$ : -9.6 148+	PPAR $\alpha$ : -9.0	PPAR $\alpha$ : -9.2
PPAR $\beta$	PPAR $\beta$ : -8.3 PC+	PPAR $\beta$ : -8.9	PPAR $\beta$ : -10.5	PPAR $\beta$ : -10.7 PC-	PPAR $\beta$ : -10.6 PC-	PPAR $\beta$ : -10.0 PC-	PPAR $\beta$ : -9.5 PC+	PPAR $\beta$ : -9.4 PC+
PPAR $\gamma$	PPAR $\gamma$ : -8.7 PC+	PPAR $\gamma$ : -7.5	PPAR $\gamma$ : -10.2	PPAR $\gamma$ : -9.7 PC+	PPAR $\gamma$ : -9.2 144+,PC-	PPAR $\gamma$ : -10.6 DB+,PC+	PPAR $\gamma$ : -10.7 PC-	PPAR $\gamma$ : -8.8 PC+
RXR $\alpha$	RXR $\alpha$ : -9.0 PC+	RXR $\alpha$ : -8.1	RXR $\alpha$ : -10.8	RXR $\alpha$ : -7.5 PC+	RXR $\alpha$ : -7.8	RXR $\alpha$ : -4.2 PC+	RXR $\alpha$ : -10.5 PC-	RXR $\alpha$ : -6.8
TR $\alpha$	TR $\alpha$ : -7.7	TR $\alpha$ : -7.7	TR $\alpha$ : -8.0	TR $\alpha$ : -5.2	TR $\alpha$ : -4.3	TR $\alpha$ : 8.9	TR $\alpha$ : -6.6	TR $\alpha$ : -1.5
TR $\beta$	TR $\beta$ : -8.1 PC-	TR $\beta$ : -12.4 PC-	TR $\beta$ : -7.7	TR $\beta$ : -9.4 PC-	TR $\beta$ : -5.7	TR $\beta$ : -1.5 PC+	TR $\beta$ : -8.1 PC-	TR $\beta$ : -4.5 PC+
ATC	C03BA11	C03DA01	C07AB12	C09CA04	C09CA06	C09CA07	C10AX09	D01AC08 J02AB02

Spojina	Bifonazol	Naftifin	Tipranavir	Adapalen	Noretisteron	Norelgestromin	Linestrenol	Norgestrel
AR	AR : -1.7	AR : -7.9	AR : 1.9 PC+	AR : 11.3 PC+	AR : -8.9 CH+,PC+	AR : -8.7 CH+,PC+	AR : -8.7 CH+	AR : -8.6 CH+,PC+
AR an.	AR an.: -5.7 PC+	AR an.: -8.7	AR an.: 1.3 PC+	AR an.: 14.0 PC+	AR an.: -9.1 CH+,PC+	AR an.: -7.7 CH+,PC+	AR an.: -8.7 CH+	AR an.: -8.8 CH+,PC+
ER $\alpha$	ER $\alpha$ : -8.6	ER $\alpha$ : -8.9	ER $\alpha$ : -8.4 116-,PC-	ER $\alpha$ : -7.9 PC+	ER $\alpha$ : -7.6 CH-,PC-	ER $\alpha$ : -9.8 CH+,PC+	ER $\alpha$ : -8.6 CH+	ER $\alpha$ : -7.0 PC-
ER $\alpha$ an.	ER $\alpha$ an.: -9.3	ER $\alpha$ an.: -9.0	ER $\alpha$ an.: -8.8 116-,PC-	ER $\alpha$ an.: -9.6 PC+	ER $\alpha$ an.: -9.0 CH+,PC-	ER $\alpha$ an.: -7.0	ER $\alpha$ an.: -8.8 CH+	ER $\alpha$ an.: -7.7 PC+
ER $\beta$	ER $\beta$ : -0.3	ER $\beta$ : -9.5	ER $\beta$ : -0.5 116+	ER $\beta$ : 3.0	ER $\beta$ : -7.5	ER $\beta$ : -8.2	ER $\beta$ : -7.0	ER $\beta$ : -6.4
ER $\beta$ an.	ER $\beta$ an.: -9.3	ER $\beta$ an.: -8.7	ER $\beta$ an.: -9.0 116-	ER $\beta$ an.: -8.9	ER $\beta$ an.: -9.3	ER $\beta$ an.: -7.2	ER $\beta$ an.: -8.5	ER $\beta$ an.: -6.9
GR	GR: -9.6	GR: -9.3	GR: -10.5 116-,PC-	GR: -10.4 PC-	GR: -9.0 CH+,PC+	GR: -8.9 CH+	GR: -9.0 CH+	GR: -8.0 CH+,PC-
GR an.	GR an.: -9.0 PC+	GR an.: -8.8	GR an.: -10.3 116-,PC+	GR an.: -9.9 PC+	GR an.: -8.7 CH+,PC-	GR an.: -7.3 CH-,PC-	GR an.: -8.2 CH+	GR an.: -7.6 CH+,PC+
LXR $\alpha$	LXR $\alpha$ : -10.8	LXR $\alpha$ : -10.3	LXR $\alpha$ : -10.4 116+	LXR $\alpha$ : -12.4	LXR $\alpha$ : -9.8	LXR $\alpha$ : -11.0	LXR $\alpha$ : -10.1 155+	LXR $\alpha$ : -8.8
LXR $\beta$	LXR $\beta$ : -10.8	LXR $\beta$ : -10.6	LXR $\beta$ : -10.7 116+	LXR $\beta$ : -13.3	LXR $\beta$ : -10.5	LXR $\beta$ : -10.5	LXR $\beta$ : -10.5 155+	LXR $\beta$ : -10.3
PPAR $\alpha$	PPAR $\alpha$ : -8.6	PPAR $\alpha$ : -7.8	PPAR $\alpha$ : -10.3	PPAR $\alpha$ : -8.8 CH-	PPAR $\alpha$ : -6.4	PPAR $\alpha$ : -6.2	PPAR $\alpha$ : -7.0	PPAR $\alpha$ : -6.3
PPAR $\beta$	PPAR $\beta$ : -10.2 PC-	PPAR $\beta$ : -9.8	PPAR $\beta$ : -10.8	PPAR $\beta$ : -9.5 CH-	PPAR $\beta$ : -7.6 PC+	PPAR $\beta$ : -7.5	PPAR $\beta$ : -8.1	PPAR $\beta$ : -7.1 PC+
PPAR $\gamma$	PPAR $\gamma$ : -9.1 PC-	PPAR $\gamma$ : -9.1	PPAR $\gamma$ : -9.6	PPAR $\gamma$ : -10.1 PC-	PPAR $\gamma$ : -6.7 PC+	PPAR $\gamma$ : -7.9	PPAR $\gamma$ : -6.7	PPAR $\gamma$ : -6.8 PC+

RXR $\alpha$	RXR $\alpha$ : -10.0	RXR $\alpha$ : -9.6	RXR $\alpha$ : -8.0	RXR $\alpha$ : -9.5 PC+	RXR $\alpha$ : -9.3 PC+	RXR $\alpha$ : -6.9	RXR $\alpha$ : -9.4	RXR $\alpha$ : -9.2 PC+			
TR $\alpha$	TR $\alpha$ : -6.7	TR $\alpha$ : -9.9	TR $\alpha$ : -2.7	TR $\alpha$ : -0.7	TR $\alpha$ : -5.3	TR $\alpha$ : -3.4	TR $\alpha$ : -6.4	TR $\alpha$ : -5.2			
TR $\beta$	TR $\beta$ : -9.1	TR $\beta$ : -8.1	TR $\beta$ : -3.5 PC+	TR $\beta$ : -2.3 PC+	TR $\beta$ : -7.7 PC+	TR $\beta$ : -8.9	TR $\beta$ : -8.0	TR $\beta$ : -8.1 PC-			
ATC	D01AC10 D01AC60	D01AE22	D10AD03	D10AD03 D10AD53	G03AA05 G03AB04 G03AC01	G03DC02 G03FA01 G03FB05	G03AA13	G03AC02 G03DC03 G03FA07	G03FB02 G03AA03 G03AB02	G03AC03 G03AD01 G03FA11 G03FB09 G03AA07	G03AB03 G03FA10 G03FB01 G03AA06

Spojina	Dezogestrel	Didrogesteron	Progesteron	Prasteron	Darifenacin	Tadalafil	Cinacalcet	Vorikonazol
AR	AR $\alpha$ : -8.9 CH+,PC+	AR $\alpha$ : -10.1 157+,CH+,PC+	AR $\alpha$ : -9.9 CH+,PC+	AR $\alpha$ : -10.2 CH+,160+,PC-	AR $\alpha$ : -2.4	AR $\alpha$ : 11.5 PC+	AR $\alpha$ : -7.0	AR $\alpha$ : -8.1 PC-
AR an.	AR an.: -9.3 CH+, PC+	AR an.: -9.0 157+,CH+,PC+	AR an.: -8.5 CH+, PC+	AR an.: -9.9 CH+,160+,PC+	AR an.: -6.8	AR an.: 1.0 PC+	AR an.: -7.4	AR an.: -8.8 PC-
ER $\alpha$	ER $\alpha$ : -9.1 DB+,PC+	ER $\alpha$ : -8.7 157-,PC-	ER $\alpha$ : -8.2 DB-,PC-	ER $\alpha$ : -8.9 CH+,160+,PC+	ER $\alpha$ : -9.7	ER $\alpha$ : -9.1 PC-	ER $\alpha$ : -9.8	ER $\alpha$ : -8.4 PC-
ER $\alpha$ an.	ER $\alpha$ an.: -8.9 PC-	ER $\alpha$ an.: -9.9 157-,PC-	ER $\alpha$ an.: -7.6 PC-	ER $\alpha$ an.: -9.5 CH+	ER $\alpha$ an.: -10.0	ER $\alpha$ an.: -9.7 PC-	ER $\alpha$ an.: -8.4	ER $\alpha$ an.: -8.7 PC-
ER $\beta$	ER $\beta$ : -7.7 DB-	ER $\beta$ : -9.7 157-	ER $\beta$ : -7.4	ER $\beta$ : -8.4 CH+,160+	ER $\beta$ : -5.9	ER $\beta$ : 0.7	ER $\beta$ : -9.0	ER $\beta$ : -8.1
ER $\beta$ an.	ER $\beta$ an.: -7.5	ER $\beta$ an.: -7.3 157+	ER $\beta$ an.: -8.2	ER $\beta$ an.: -8.7 CH+	ER $\beta$ an.: -8.7	ER $\beta$ an.: -9.6	ER $\beta$ an.: -9.6	ER $\beta$ an.: -8.5
GR	GR: -8.9 CH+	GR: -9.6 CH+	GR: -9.5 CH+,PC-	GR: -9.0 CH+,160-	GR: -9.9	GR: -4.8 PC+	GR: -8.3	GR: -7.8 PC-
GR an.	GR an.: -7.9 CH+	GR an.: -8.3 157+,CH+	GR an.: -8.2 CH-,PC-	GR an.: -8.3 CH+, PC+	GR an.: -9.3	GR an.: -10.0 PC-	GR an.: -7.8	GR an.: -7.8 PC-
LXR $\alpha$	LXR $\alpha$ : -9.5	LXR $\alpha$ : -10.9	LXR $\alpha$ : -10.4	LXR $\alpha$ : -10.3 CH+	LXR $\alpha$ : -10.2	LXR $\alpha$ : -5.7	LXR $\alpha$ : -11.2	LXR $\alpha$ : -9.0
LXR $\beta$	LXR $\beta$ : -9.7	LXR $\beta$ : -11.3	LXR $\beta$ : -11.1	LXR $\beta$ : -10.8	LXR $\beta$ : -11.3	LXR $\beta$ : -5.6	LXR $\beta$ : -11.3	LXR $\beta$ : -8.8
PPAR $\alpha$	PPAR $\alpha$ : -6.4	PPAR $\alpha$ : -9.6	PPAR $\alpha$ : -5.1	PPAR $\alpha$ : -7.0 DB+	PPAR $\alpha$ : -10.2	PPAR $\alpha$ : -7.0	PPAR $\alpha$ : -8.5	PPAR $\alpha$ : -8.2
PPAR $\beta$	PPAR $\beta$ : -7.3	PPAR $\beta$ : -8.6 PC+	PPAR $\beta$ : -8.2 PC+	PPAR $\beta$ : -8.0 PC+	PPAR $\beta$ : -9.8	PPAR $\beta$ : -10.2	PPAR $\beta$ : -10.2	PPAR $\beta$ : -7.4 PC+
PPAR $\gamma$	PPAR $\gamma$ : -7.6 PC+	PPAR $\gamma$ : -7.2 PC+	PPAR $\gamma$ : -6.8 PC+	PPAR $\gamma$ : -7.0 PC+	PPAR $\gamma$ : -9.2	PPAR $\gamma$ : -9.7 PC-	PPAR $\gamma$ : -9.5 CH+	PPAR $\gamma$ : -7.4 PC+
RXR $\alpha$	RXR $\alpha$ : -9.0	RXR $\alpha$ : -8.2	RXR $\alpha$ : -7.9	RXR $\alpha$ : -8.1	RXR $\alpha$ : -10.6	RXR $\alpha$ : -7.7 PC+	RXR $\alpha$ : -10.2	RXR $\alpha$ : -7.9 PC+
TR $\alpha$	TR $\alpha$ : -5.6	TR $\alpha$ : -8.7	TR $\alpha$ : -4.0 CH-	TR $\alpha$ : -7.9	TR $\alpha$ : -6.6	TR $\alpha$ : 11.2	TR $\alpha$ : -10.5	TR $\alpha$ : -7.8
TR $\beta$	TR $\beta$ : -7.3	TR $\beta$ : -10.5 PC-	TR $\beta$ : -8.3 CH+,PC-	TR $\beta$ : -10.4 PC-	TR $\beta$ : -8.7	TR $\beta$ : 5.3 PC+	TR $\beta$ : -10.1	TR $\beta$ : -7.4 PC+
ATC	G03AC09	G03AC10	G03DA04	G03DB01	G04BD10	G04BE08	H05BX01	J02AC03

Spojina	Indinavir	Ritonavir	Nelfinavir	Darunavir	Maravirok	Lopinavir	Paritaprevir	Imatinib
AR	AR $\alpha$ : -1.6	AR $\alpha$ : 6.4 PC+	AR $\alpha$ : 6.3	AR $\alpha$ : 1.2 PC+	AR $\alpha$ : 0.7	AR $\alpha$ : 1.4 PC+	AR $\alpha$ : 51.8	AR $\alpha$ : 4.1
AR an.	AR an.: -1.8	AR an.: 5.6 PC+	AR an.: 2.0	AR an.: 2.9 PC+	AR an.: -2.0	AR an.: 1.3	AR an.: 49.3	AR an.: 0.8
ER $\alpha$	ER $\alpha$ : -8.8	ER $\alpha$ : -9.1 116,164-, PC-	ER $\alpha$ : -8.2	ER $\alpha$ : -8.3 116-,PC-	ER $\alpha$ : -7.4 116+	ER $\alpha$ : -6.9 PC+	ER $\alpha$ : -7.1	ER $\alpha$ : -8.2
ER $\alpha$ an.	ER $\alpha$ an.: -11.1	ER $\alpha$ an.: -9.1 116+,163+,PC-	ER $\alpha$ an.: -10.5	ER $\alpha$ an.: -9.7 116-,PC-	ER $\alpha$ an.: -9.4 116-	ER $\alpha$ an.: -9.0 PC+	ER $\alpha$ an.: -7.6	ER $\alpha$ an.: -9.8
ER $\beta$	ER $\beta$ : 0.9	ER $\beta$ : 7.4 116+	ER $\beta$ : 4.4	ER $\beta$ : -2.5 116+	ER $\beta$ : 2.1 116+	ER $\beta$ : 1.5	ER $\beta$ : 51.8	ER $\beta$ : 2.5
ER $\beta$ an.	ER $\beta$ an.: -8.3	ER $\beta$ an.: -9.5 116-	ER $\beta$ an.: -9.6	ER $\beta$ an.: -9.7 116-	ER $\beta$ an.: -9.7 116-	ER $\beta$ an.: -7.2	ER $\beta$ an.: -7.8	ER $\beta$ an.: -9.0
GR	GR: -4.8	GR: -9.5 116-, PC-	GR: -8.0	GR: -9.1 116, PC-	GR: -9.7 116-	GR: -8.0 PC-	GR: 16.2	GR: -10.0
GR an.	GR an.: -10.5	GR an.: -11.3 PC+	GR an.: -10.9	GR an.: -9.6 116-,PC-	GR an.: -9.4 116-	GR an.: -9.4 PC+	GR an.: -10.1	GR an.: -10.1
LXR $\alpha$	LXR $\alpha$ : -10.1	LXR $\alpha$ : -8.9	LXR $\alpha$ : -7.1	LXR $\alpha$ : -9.0 116-	LXR $\alpha$ : -11.2 116+	LXR $\alpha$ : -8.4	LXR $\alpha$ : -5.6	LXR $\alpha$ : -11.6

		164+, 116+									
LXR β	LXR β: -9.0	LXR β: -5.0	116+	LXR β: -9.3	LXR β: -10.4	116+	LXR β: -11.6	116+	LXR β: -10.4	LXR β: 8.9	LXR β: -11.3
PPAR α	PPAR α: -11.5	PPAR α: -11.0	164-	PPAR α: -10.4	165-	PPAR α: -10.5	PPAR α: -10.2	PPAR α: -9.6	PPAR α: -9.6	PPAR α: -3.8	PPAR α: -9.9
PPAR β	PPAR β: -12.0	PPAR β: -9.8	164-	PPAR β: -11.6	165-	PPAR β: -10.4	PPAR β: -10.9	PPAR β: -10.0	PPAR β: -10.0	PPAR β: 0.5	PPAR β: -8.9
PPAR γ	PPAR γ: -10.7	PPAR γ: -11.6	164-	PPAR γ: -11.5	165-	PPAR γ: -11.4	PC-	PPAR γ: -10.2	PPAR γ: -10.6	PPAR γ: -8.0	PPAR γ: -9.1
RXR α	RXR α: -3.4	RXR α: -1.9	164+	RXR α: -6.1		RXR α: -7.5		RXR α: -9.2	RXR α: -7.1	RXR α: 18.5	RXR α: -8.3
TR α	TR α: 7.5	TR α: 8.6		TR α: 4.1		TR α: 0.1		TR α: -7.6	TR α: -0.1	TR α: 46.7	TR α: -1.4
TR β	TR β: 2.1	TR β: 6.1	164+, PC+	TR β: -0.1		TR β: -6.2	PC+	TR β: -7.1	TR β: -2.7	TR β: 32.7	TR β: -2.8
ATC	J05AE02	J05AE03 J05AR10	J05AX66 J05AX67	J05AE04	J05AE10	J05AX09	J05AX66 J05AX67	J05AR10	L01XE01		

Spojina	Sorafenib	Lapatinib	Nilotinib	Afatinib	Regorafenib	Dabrafenib	Ponatinib	Nintedanib
AR	AR : -6.1	AR : 6.1	AR : 3.2	AR : 6.7	AR : -1.4	AR : 5.2	AR : 3.4	AR : 12.0
AR an.	AR an.: -6.1	AR an.: 0.2	AR an.: 3.6	AR an.: -1.3	AR an.: -6.0	AR an.: 1.7	AR an.: 3.9	AR an.: 10.0
ER α	ER α: -8.4	ER α: -8.4	ER α: -9.1	ER α: -5.8	ER α: -10.0	ER α: -8.3	ER α: -7.3	ER α: -4.9
ER α an.	ER α an.: -9.9	ER α an.: -9.0	ER α an.: -9.8	ER α an.: -8.8	ER α an.: -10.3	ER α an.: -9.9	ER α an.: -9.5	ER α an.: -8.8
ER β	ER β: -6.7	ER β: 1.4	ER β: 1.0	ER β: 2.5	ER β: -6.0	ER β: -2.1	ER β: -2.2	ER β: 7.6
ER β an.	ER β an.: -8.7	ER β an.: -8.3	ER β an.: -9.9	ER β an.: -8.7	ER β an.: -9.7	ER β an.: -9.7	ER β an.: -8.7	ER β an.: -8.0
GR	GR: -9.4	GR: -8.5	GR: -10.7	GR: -9.3	GR: -10.1	GR: -7.4	GR: -7.8	GR: -7.3
GR an.	GR an.: -8.3	GR an.: -9.7	GR an.: -10.9	GR an.: -9.5	GR an.: -9.7	GR an.: -9.5	GR an.: -10.0	GR an.: -10.0
LXR α	LXR α: -11.6	LXR α: -9.9	LXR α: -12.1	LXR α: -10.0	LXR α: -11.4	LXR α: -10.8	LXR α: -10.5	LXR α: -11.4
LXR β	LXR β: -10.8	LXR β: -9.9	LXR β: -10.1	LXR β: -10.8	LXR β: -12.1	LXR β: -11.4	LXR β: -9.4	LXR β: -9.2
PPAR α	PPAR α: -8.5	166-	PPAR α: -10.3	PPAR α: -10.1	PPAR α: -9.1	PPAR α: -8.4	PPAR α: -9.3	PPAR α: -8.6
PPAR β	PPAR β: -8.6	166-	PPAR β: -10.2	PPAR β: -10.9	PPAR β: -9.6	PPAR β: -10.8	PPAR β: -10.3	PPAR β: -9.6
PPAR γ	PPAR γ: -9.4	166+	PPAR γ: -11.0	PPAR γ: -11.6	PPAR γ: -10.4	PPAR γ: -9.4	PPAR γ: -9.7	PPAR γ: -10.6
RXR α	RXR α: -9.6	RXR α: -10.4	RXR α: -7.3	RXR α: -8.8	RXR α: -9.8	RXR α: -9.3	RXR α: -8.5	RXR α: -2.4
TR α	TR α: -4.5	TR α: 0.4	TR α: 0.4	TR α: -6.3	TR α: -4.4	TR α: -6.7	TR α: -0.4	TR α: 3.3
TR β	TR β: -7.3	TR β: -0.6	TR β: -4.6	TR β: -7.3	TR β: -6.9	TR β: -7.6	TR β: -1.1	TR β: -0.2
ATC	L01XE05	L01XE07	L01XE08	L01XE13	L01XE21	L01XE23	L01XE24	L01XE31

Spojina	Ibrutinib	Ceritinib	Irinotekan	Celekoksib	Abirateronacetat	Pleriksafor	Pomalidomid	Talidomid		
AR	AR : 5.8	AR : 3.3	AR : 16.3	AR : 3.6	AR : 3.2	PC+	AR : 13.3	AR : -8.7	PC-	
AR an.	AR an.: 6.7	AR an.: 0.5	AR an.: 17.8	AR an.: -3.6	AR an.: 1.4	PC+	AR an.: 10.6	AR an.: -8.3	AR an.: -8.5	PC-
ER α	ER α: -6.5	ER α: -7.6	ER α: -6.0	ER α: -9.6	ER α: -4.9	PC-	ER α: -9.0	ER α: -8.5	ER α: -8.6	PC-
ER α an.	ER α an.: -9.1	ER α an.: -10.3	ER α an.: -9.4	ER α an.: -9.9	ER α an.: -6.5	PC+	ER α an.: -10.8	ER α an.: -8.8	ER α an.: -8.3	PC-
ER β	ER β: 0.4	ER β: 4.1	ER β: 18.7	ER β: -3.1	ER β: 2.7		ER β: 7.4	ER β: -8.4	ER β: -8.4	
ER β an.	ER β an.: -8.8	ER β an.: -9.2	ER β an.: -9.7	ER β an.: -9.3	ER β an.: -7.1		ER β an.: -10.9	ER β an.: -8.6	ER β an.: -8.0	
GR	GR: -10.3	GR: -8.4	GR: -4.2	GR: -7.0	GR: -10.8	PC-	GR: 0.3	GR: -8.0	GR: -8.4	PC-
GR an.	GR an.: -9.9	GR an.: -9.8	GR an.: -11.1	GR an.: -8.8	GR an.: -9.3		GR an.: -10.4	GR an.: -8.4	GR an.: -8.0	PC-
LXR α	LXR α: -11.6	LXR α: -10.5	LXR α: -9.7	LXR α: -10.2	LXR α: -9.8		LXR α: -10.0	LXR α: -9.0	LXR α: -8.7	
LXR β	LXR β: -12.7	LXR β: -11.2	LXR β: -1.8	LXR β: -8.4	LXR β: -11.4		LXR β: -7.8	LXR β: -9.2	LXR β: -9.3	
PPAR α	PPAR α: -9.2	PPAR α: -9.9	PPAR α: -9.3	PPAR α: -7.9	PPAR α: -4.6		PPAR α: -6.1	PPAR α: -8.9	PPAR α: -8.2	
PPAR β	PPAR β: -10.8	PPAR β: -9.7	PPAR β: -10.2	PPAR β: -9.3	PPAR β: -7.2		PPAR β: -7.5	PPAR β: -8.0	PPAR β: -8.1	PC+
PPAR γ	PPAR γ: -10.5	PPAR γ: -9.7	PPAR γ: -9.6	PPAR γ: -8.7	PPAR γ: -6.9	PC+	PPAR γ: -9.4	PPAR γ: -7.6	PPAR γ: -7.9	PC+
RXR α	RXR α: -6.4	RXR α: -6.5	RXR α: 2.7	RXR α: -10.5	RXR α: -3.6		RXR α: 3.6	RXR α: -8.5	RXR α: -8.6	PC+
TR α	TR α: -3.8	TR α: -0.2	TR α: 7.8	TR α: -1.7	TR α: -3.3		TR α: 10.3	TR α: -8.3	TR α: -7.4	
TR β	TR β: -5.1	TR β: -4.2	TR β: -0.3	TR β: -4.1	TR β: -6.9	PC+	TR β: 8.4	TR β: -7.8	TR β: -8.4	PC-

ATC	L01XE27	L01XE28	L01XX19	L01XX33 M01AH01	L02BX03	L03AX16	L04AX06	L04AX02
-----	---------	---------	---------	--------------------	---------	---------	---------	---------

Spojina	Parekoksib	Lumirakoksib	Morfin	Hidromorfon	Dihidroergotamin	Klonazepam	Karbamazepin	Okskarbazepin	
AR	AR : -2.2	AR : -8.1 PC-	AR : -6.4	AR : -6.9	AR : 33.0 PC+	AR : -2.5	AR : -8.5 PC+	AR : -8.2 PC-	
AR an.	AR an. : -6.3	AR an. : -8.5 PC-	AR an. : -8.6	AR an. : -9.2	AR an. : 20.9 PC-	AR an. : -6.8	AR an. : -8.8 PC-	AR an. : -8.5 PC-	
ER $\alpha$	ER $\alpha$ : -8.8	ER $\alpha$ : -8.5 PC-	ER $\alpha$ : -9.4	ER $\alpha$ : -9.8	ER $\alpha$ : -7.6 PC+	ER $\alpha$ : -8.7	ER $\alpha$ : -9.6 PC-	ER $\alpha$ : -9.9 PC-	
ER $\alpha$ an.	ER $\alpha$ an. : -9.7	ER $\alpha$ an. : -8.5 PC+	ER $\alpha$ an. : -8.7	ER $\alpha$ an. : -9.1	ER $\alpha$ an. : -8.5 PC+	ER $\alpha$ an. : -8.7	ER $\alpha$ an. : -9.2 PC-	ER $\alpha$ an. : -9.0 PC-	
ER $\beta$	ER $\beta$ : -5.0	ER $\beta$ : -8.2	ER $\beta$ : -9.5	ER $\beta$ : -9.4	ER $\beta$ : 22.2	ER $\beta$ : -8.9	ER $\beta$ : -9.2	ER $\beta$ : -8.7	
ER $\beta$ an.	ER $\beta$ an. : -8.8	ER $\beta$ an. : -8.4	ER $\beta$ an. : -9.0	ER $\beta$ an. : -9.5	ER $\beta$ an. : -9.0	ER $\beta$ an. : -9.3	ER $\beta$ an. : -9.8	ER $\beta$ an. : -9.2	
GR	GR : -9.2	GR : -8.1 PC-	GR : -8.2	GR : -8.2	GR : 7.9 PC+	GR : -8.2	GR : -8.6 PC+	GR : -8.7 PC-	
GR an.	GR an. : -8.1	GR an. : -7.6 PC+	GR an. : -8.4	GR an. : -8.7	GR an. : -11.6 PC-	GR an. : -8.5	GR an. : -8.7 PC-	GR an. : -8.6 PC-	
LXR $\alpha$	LXR $\alpha$ : -9.4	LXR $\alpha$ : -9.1	LXR $\alpha$ : -9.5	LXR $\alpha$ : -9.9	LXR $\alpha$ : -7.0	LXR $\alpha$ : -9.3	LXR $\alpha$ : -9.0	LXR $\alpha$ : -8.0	
LXR $\beta$	LXR $\beta$ : -9.7	LXR $\beta$ : -9.0	LXR $\beta$ : -9.2	LXR $\beta$ : -9.5	LXR $\beta$ : -4.3	LXR $\beta$ : -8.4	LXR $\beta$ : -9.3	LXR $\beta$ : -9.3	
PPAR $\alpha$	PPAR $\alpha$ : -8.4	PPAR $\alpha$ : -7.6	PPAR $\alpha$ : -8.4	PPAR $\alpha$ : -8.2	PPAR $\alpha$ : -3.8	PPAR $\alpha$ : -7.9	PPAR $\alpha$ : -8.8 PC+	PPAR $\alpha$ : -8.3	
PPAR $\beta$	PPAR $\beta$ : -8.6	PPAR $\beta$ : -8.0 PC+	PPAR $\beta$ : -7.4	PPAR $\beta$ : -7.4	PPAR $\beta$ : -6.3 PC+	PPAR $\beta$ : -8.2	PPAR $\beta$ : -8.8 PC+	PPAR $\beta$ : -8.4 PC+	
PPAR $\gamma$	PPAR $\gamma$ : -9.2	PPAR $\gamma$ : -7.9 PC-	PPAR $\gamma$ : -7.4	PPAR $\gamma$ : -6.9	PPAR $\gamma$ : -9.6	PPAR $\gamma$ : -7.6	PPAR $\gamma$ : -7.6 PC+	PPAR $\gamma$ : -8.5 PC+	
RXR $\alpha$	RXR $\alpha$ : -9.9	RXR $\alpha$ : -8.6 PC+	RXR $\alpha$ : -7.3	RXR $\alpha$ : -7.8	RXR $\alpha$ : 5.7 PC+	RXR $\alpha$ : -8.5	RXR $\alpha$ : -9.0 PC+	RXR $\alpha$ : -9.1 PC+	
TR $\alpha$	TR $\alpha$ : -6.9	TR $\alpha$ : -8.6	TR $\alpha$ : -6.2	TR $\alpha$ : -7.5	TR $\alpha$ : 17.4	TR $\alpha$ : -6.4	TR $\alpha$ : -7.9	TR $\alpha$ : -8.1	
TR $\beta$	TR $\beta$ : -8.1	TR $\beta$ : -9.1 CH+,PC-	TR $\beta$ : -9.0	TR $\beta$ : -9.6	TR $\beta$ : 13.6	TR $\beta$ : -8.1	TR $\beta$ : -8.9 PC-	TR $\beta$ : -8.4 PC-	
ATC	M01AH04	M01AH06	N02AA01 A07DA52	N02AA51	N02CA01 N02CA51	N03AE01	N02AA03	N03AF01	N03AF02

Spojina	Eslikarbazepin	Lurasidon	Klozapin	Asenapin	Risperidon	Paliperidon	Biperiden	Diazepam
AR	AR : -7.8	AR : 0.8	AR : -2.2 PC+	AR : -4.4 PC+	AR : -1.4 PC+	AR : -6.5	AR : -8.5	AR : -5.2 PC+
AR an.	AR an. : -8.0	AR an. : -1.3	AR an. : -6.1 PC-	AR an. : -8.5 PC-	AR an. : -3.1 PC+	AR an. : -8.0	AR an. : -9.4	AR an. : -7.7 PC+
ER $\alpha$	ER $\alpha$ : -9.9	ER $\alpha$ : -7.2	ER $\alpha$ : -8.3 PC-	ER $\alpha$ : -9.7 PC-	ER $\alpha$ : -8.6 PC-	ER $\alpha$ : -8.8	ER $\alpha$ : -9.4	ER $\alpha$ : -9.5 PC-
ER $\alpha$ an.	ER $\alpha$ an. : -8.4	ER $\alpha$ an. : -9.9	ER $\alpha$ an. : -8.1 PC+	ER $\alpha$ an. : -9.7 PC-	ER $\alpha$ an. : -9.7 PC-	ER $\alpha$ an. : -9.6	ER $\alpha$ an. : -9.0	ER $\alpha$ an. : -8.5 PC-
ER $\beta$	ER $\beta$ : -8.8	ER $\beta$ : -3.6	ER $\beta$ : -5.5	ER $\beta$ : -9.1	ER $\beta$ : -4.1	ER $\beta$ : -5.5	ER $\beta$ : -8.4 CH+	ER $\beta$ : -8.5
ER $\beta$ an.	ER $\beta$ an. : -9.0	ER $\beta$ an. : -9.2	ER $\beta$ an. : -8.8	ER $\beta$ an. : -9.6	ER $\beta$ an. : -9.5	ER $\beta$ an. : -8.5	ER $\beta$ an. : -8.6 CH+	ER $\beta$ an. : -8.6
GR	GR : -8.8	GR : -8.6	GR : -8.4 PC-	GR : -8.3 PC-	GR : -10.4 PC-	GR : -10.6	GR : -8.5	GR : -8.1 PC-
GR an.	GR an. : -8.4	GR an. : -10.0	GR an. : -8.6 PC-	GR an. : -8.9 PC-	GR an. : -9.7 PC-	GR an. : -9.7	GR an. : -7.7	GR an. : -8.4 PC-
LXR $\alpha$	LXR $\alpha$ : -8.3	LXR $\alpha$ : -12.1	LXR $\alpha$ : -10.1	LXR $\alpha$ : -9.9	LXR $\alpha$ : -11.6	LXR $\alpha$ : -11.1	LXR $\alpha$ : -10.1	LXR $\alpha$ : -9.2
LXR $\beta$	LXR $\beta$ : -8.6	LXR $\beta$ : -12.6	LXR $\beta$ : -10.0	LXR $\beta$ : -10.2	LXR $\beta$ : -12.3	LXR $\beta$ : -11.8	LXR $\beta$ : -9.4	LXR $\beta$ : -8.4
PPAR $\alpha$	PPAR $\alpha$ : -8.6	PPAR $\alpha$ : -8.9	PPAR $\alpha$ : -10.4	PPAR $\alpha$ : -8.7	PPAR $\alpha$ : -9.7	PPAR $\alpha$ : -9.7	PPAR $\alpha$ : -7.9	PPAR $\alpha$ : -8.0
PPAR $\beta$	PPAR $\beta$ : -8.5	PPAR $\beta$ : -10.3	PPAR $\beta$ : -9.2 PC+	PPAR $\beta$ : -8.8 PC+	PPAR $\beta$ : -11.2 PC-	PPAR $\beta$ : -11.3	PPAR $\beta$ : -8.6	PPAR $\beta$ : -8.2 PC+
PPAR $\gamma$	PPAR $\gamma$ : -8.2	PPAR $\gamma$ : -9.4	PPAR $\gamma$ : -8.3 PC+	PPAR $\gamma$ : -7.4 PC+	PPAR $\gamma$ : -10.1 PC-	PPAR $\gamma$ : -9.6	PPAR $\gamma$ : -7.7	PPAR $\gamma$ : -7.8 PC+
RXR $\alpha$	RXR $\alpha$ : -9.0	RXR $\alpha$ : -8.8	RXR $\alpha$ : -7.0 PC+	RXR $\alpha$ : -8.2 PC+	RXR $\alpha$ : -10.0 PC+	RXR $\alpha$ : -10.5	RXR $\alpha$ : -9.3	RXR $\alpha$ : -8.8 PC+
TR $\alpha$	TR $\alpha$ : -8.4	TR $\alpha$ : -3.1	TR $\alpha$ : -3.8	TR $\alpha$ : -6.8	TR $\alpha$ : -5.8	TR $\alpha$ : -7.6	TR $\alpha$ : -8.6	TR $\alpha$ : -7.2
TR $\beta$	TR $\beta$ : -8.4	TR $\beta$ : -5.9	TR $\beta$ : -5.9 PC-	TR $\beta$ : -9.4	TR $\beta$ : -7.5 PC+	TR $\beta$ : -8.8	TR $\beta$ : -9.1	TR $\beta$ : -7.4 PC+
ATC	N03AF04	N05AE05	N05AH02	N05AH05	N05AX08	N05AX13	N04AA02	N05BA01

Spojina	Oksazepam	Lorazepam		Maprotilin	Paroksetin	Sertralin	Mianserin	Vortiooksetin	Naltrekson
AR	AR : -5.5 PC-	AR : -5.6 PC+		AR : -7.6 PC-	AR : -7.4 PC-	AR : -6.5	AR : -6.0 PC+	AR : -7.1	AR : -7.6 PC-
AR an.	AR an.: -8.4 PC+	AR an.: -8.3 PC-		AR an.: -8.6 PC+	AR an.: -8.3 PC+	AR an.: -7.2	AR an.: -7.8 PC-	AR an.: -8.5	AR an.: -8.7 PC-
ER $\alpha$	ER $\alpha$ : -9.1 PC+	ER $\alpha$ : -9.1 PC-		ER $\alpha$ : -9.6 PC-	ER $\alpha$ : -9.5 PC-	ER $\alpha$ : -9.5	ER $\alpha$ : -9.3	ER $\alpha$ : -8.5	ER $\alpha$ : -8.2 PC+
ER $\alpha$ an.	ER $\alpha$ an.: -8.5 PC-	ER $\alpha$ an.: -8.7 PC-		ER $\alpha$ an.: -9.1 PC-	ER $\alpha$ an.: -9.2 PC-	ER $\alpha$ an.: -8.7	ER $\alpha$ an.: -8.3 PC-	ER $\alpha$ an.: -8.4	ER $\alpha$ an.: -8.6 PC-
ER $\beta$	ER $\beta$ : -9.4	ER $\beta$ : -9.6		ER $\beta$ : -8.8	ER $\beta$ : -7.7	ER $\beta$ : -9.1	ER $\beta$ : -8.9	ER $\beta$ : -8.3	ER $\beta$ : -7.7
ER $\beta$ an.	ER $\beta$ an.: -9.1	ER $\beta$ an.: -9.2		ER $\beta$ an.: -8.6	ER $\beta$ an.: -8.9	ER $\beta$ an.: -8.5	ER $\beta$ an.: -9.4	ER $\beta$ an.: -8.1	ER $\beta$ an.: -7.4
GR	GR: -8.1 PC-	GR: -8.4 PC-		GR: -8.6 CH+,PC-	GR: -9.1 PC-	GR: -8.2	GR: -7.4	GR: -8.8	GR: -7.7 PC-
GR an.	GR an.: -8.3 PC+	GR an.: -8.6 PC-		GR an.: -8.3 CH+,PC-	GR an.: -8.7 PC-	GR an.: -8.5	GR an.: -8.7	GR an.: -8.1	GR an.: -8.5 PC-
LXR $\alpha$	LXR $\alpha$ : -9.5	LXR $\alpha$ : -9.4		LXR $\alpha$ : -9.3	LXR $\alpha$ : -10.1	LXR $\alpha$ : -9.7	LXR $\alpha$ : -9.4	LXR $\alpha$ : -9.6	LXR $\alpha$ : -9.5
LXR $\beta$	LXR $\beta$ : -8.3	LXR $\beta$ : -8.2		LXR $\beta$ : -9.11	LXR $\beta$ : -10.4	LXR $\beta$ : -9.6	LXR $\beta$ : -9.4	LXR $\beta$ : -9.7	LXR $\beta$ : -9.8
PPAR $\alpha$	PPAR $\alpha$ : -8.8	PPAR $\alpha$ : -8.8		PPAR $\alpha$ : -8.1	PPAR $\alpha$ : -8.7	PPAR $\alpha$ : -8.5	PPAR $\alpha$ : -8.7	PPAR $\alpha$ : -8.5	PPAR $\alpha$ : -8.1
PPAR $\beta$	PPAR $\beta$ : -8.0 PC+	PPAR $\beta$ : -7.9		PPAR $\beta$ : -8.1 PC-	PPAR $\beta$ : -8.7 PC+	PPAR $\beta$ : -9.0	PPAR $\beta$ : -7.0 PC+	PPAR $\beta$ : -8.1	PPAR $\beta$ : -7.5 PC+
PPAR $\gamma$	PPAR $\gamma$ : -7.6 PC+	PPAR $\gamma$ : -7.6 PC+		PPAR $\gamma$ : -8.1 PC+	PPAR $\gamma$ : -9.1	PPAR $\gamma$ : -8.1	PPAR $\gamma$ : -8.5 PC+	PPAR $\gamma$ : -8.0	PPAR $\gamma$ : -6.6 PC+
RXR $\alpha$	RXR $\alpha$ : -8.3 PC+	RXR $\alpha$ : -8.3		RXR $\alpha$ : -8.9	RXR $\alpha$ : -10.2 PC-	RXR $\alpha$ : -9.5	RXR $\alpha$ : -9.1 PC+	RXR $\alpha$ : -8.9	RXR $\alpha$ : -8.6 PC+
TR $\alpha$	TR $\alpha$ : -7.1	TR $\alpha$ : -7.8		TR $\alpha$ : -9.0	TR $\alpha$ : -9.0	TR $\alpha$ : -8.2	TR $\alpha$ : -4.9	TR $\alpha$ : -8.1	TR $\alpha$ : -5.3
TR $\beta$	TR $\beta$ : -7.9 PC-	TR $\beta$ : -8.2		TR $\beta$ : -9.0 PC-	TR $\beta$ : -9.7	TR $\beta$ : -9.3	TR $\beta$ : -6.2	TR $\beta$ : -8.9	TR $\beta$ : -7.9 PC-
ATC	N05BA04	N05BA06	N05BA56	N06AA21	N06AB05	N06AB06	N06AX03	N06AX26	N07BB04

Spojina	Atovakon	Olopatadin		Zafirlukast	Ebastin	Feksofenadin	Rupatadin	Montelukast	Kodein	
AR	AR : -0.9 PC+	AR : -6.9		AR : 7.5 PC-	AR : -2.0 PC+	AR : -0.6	AR : 7.5	AR : 0.0	AR : -6.8 PC-	
AR an.	AR an.: 1.6 PC+	AR an.: -8.7		AR an.: 5.9 PC-	AR an.: -0.7 PC+	AR an.: -1.9	AR an.: 0.9	AR an.: -0.3	AR an.: -8.9 PC-	
ER $\alpha$	ER $\alpha$ : -6.5 PC+	ER $\alpha$ : -9.5		ER $\alpha$ : -7.0 PC+	ER $\alpha$ : -10.0 PC-	ER $\alpha$ : -9.4	ER $\alpha$ : -7.5	ER $\alpha$ : -9.1	ER $\alpha$ : -9.0 PC-	
ER $\alpha$ an.	ER $\alpha$ an.: -8.2 PC-	ER $\alpha$ an.: -9.2		ER $\alpha$ an.: -7.9 PC+	ER $\alpha$ an.: -10.5	ER $\alpha$ an.: -9.1	ER $\alpha$ an.: -8.9	ER $\alpha$ an.: -10.2	ER $\alpha$ an.: -8.4 PC-	
ER $\beta$	ER $\beta$ : 1.5	ER $\beta$ : -3.7		ER $\beta$ : 0.9	ER $\beta$ : -0.8	ER $\beta$ : -2.1	ER $\beta$ : -2.8	ER $\beta$ : -1.2	ER $\beta$ : -8.2	
ER $\beta$ an.	ER $\beta$ an.: -8.7	ER $\beta$ an.: -8.2		ER $\beta$ an.: -9.7	ER $\beta$ an.: -9.9	ER $\beta$ an.: -9.1	ER $\beta$ an.: -9.2	ER $\beta$ an.: -9.5	ER $\beta$ an.: -8.2	
GR	GR: -11.0 PC-	GR: -8.4		GR: -9.4 PC-	GR: -9.7	GR: -9.7	GR: -7.3	GR: -9.0	GR: -8.3 PC-	
GR an.	GR an.: -9.2 PC-	GR an.: -7.9		GR an.: -10.7 PC+	GR an.: -9.4	GR an.: -9.2	GR an.: -10.8	GR an.: -10.2	GR an.: -7.9 PC-	
LXR $\alpha$	LXR $\alpha$ : -12.2	LXR $\alpha$ : -9.1		LXR $\alpha$ : -11.4	LXR $\alpha$ : -10.6	LXR $\alpha$ : -9.9	LXR $\alpha$ : -9.6	LXR $\alpha$ : -10.5	LXR $\alpha$ : -9.4	
LXR $\beta$	LXR $\beta$ : -11.8	LXR $\beta$ : -8.6		LXR $\beta$ : -9.2	LXR $\beta$ : -11.2	LXR $\beta$ : -11.2	LXR $\beta$ : -10.7	LXR $\beta$ : -10.6	LXR $\beta$ : -8.9	
PPAR $\alpha$	PPAR $\alpha$ : -8.5	PPAR $\alpha$ : -7.9		PPAR $\alpha$ : -9.4	PPAR $\alpha$ : -10.8	PPAR $\alpha$ : -10.0	PPAR $\alpha$ : -7.7	PPAR $\alpha$ : -9.4	PPAR $\alpha$ : -8.1	
PPAR $\beta$	PPAR $\beta$ : -9.4 PC+	PPAR $\beta$ : -7.7		PPAR $\beta$ : -9.4 PC+	PPAR $\beta$ : -10.5 PC-	PPAR $\beta$ : -9.8	PPAR $\beta$ : -8.5	PPAR $\beta$ : -10.2	PPAR $\beta$ : -8.5 PC+	
PPAR $\gamma$	PPAR $\gamma$ : -9.7 PC-	PPAR $\gamma$ : -8.0		PPAR $\gamma$ : -10.9 PC+	PPAR $\gamma$ : -10.1 PC-	PPAR $\gamma$ : -9.5	PPAR $\gamma$ : -9.5	PPAR $\gamma$ : -10.4	PPAR $\gamma$ : -7.3 PC+	
RXR $\alpha$	RXR $\alpha$ : -8.9	RXR $\alpha$ : -9.6		RXR $\alpha$ : -5.9 PC+	RXR $\alpha$ : -9.9	RXR $\alpha$ : -9.9	RXR $\alpha$ : -6.8	RXR $\alpha$ : -9.0	RXR $\alpha$ : -8.2 PC+	
TR $\alpha$	TR $\alpha$ : -7.8	TR $\alpha$ : -6.7		TR $\alpha$ : -1.8	TR $\alpha$ : -2.8	TR $\alpha$ : -3.8	TR $\alpha$ : 3.0	TR $\alpha$ : -1.9	TR $\alpha$ : -7.5	
TR $\beta$	TR $\beta$ : -11.5 PC-	TR $\beta$ : -9.1		TR $\beta$ : 0.1	TR $\beta$ : -6.6	TR $\beta$ : -6.8	TR $\beta$ : 1.2	TR $\beta$ : -3.5	TR $\beta$ : -7.7 PC+	
ATC	P01AX06	R01AC08	S01GX09	R03DC01	R06AX22	R06AX26	R06AX28	R03DC03	R05DA04 N02AA79	N02AA59

Spojina	Fluorescein	Deferasiroks	Kobicistat
AR	AR : 1.4 PC+	AR : -3.1 PC+	AR : 9.2
AR an.	AR an.: -4.3 PC+	AR an.: -2.2 PC-	AR an.: -0.0
ER $\alpha$	ER $\alpha$ : -8.5 PC+,CH+	ER $\alpha$ : -7.8 PC+	ER $\alpha$ : -6.9
ER $\alpha$ an.	ER $\alpha$ an.: -8.6 PC-,CH+	ER $\alpha$ an.: -9.4 PC+	ER $\alpha$ an.: -8.8
ER $\beta$	ER $\beta$ : -8.0 CH-	ER $\beta$ : -1.1	ER $\beta$ : 1.5
ER $\beta$ an.	ER $\beta$ an.: -9.7 CH+	ER $\beta$ an.: -9.0	ER $\beta$ an.: -7.4
GR	GR: -8.8	GR: -8.6	GR: -7.8
GR an.	GR an.: -9.6 PC+	GR an.: -9.3	GR an.: -9.0
LXR $\alpha$	LXR $\alpha$ : -8.8	LXR $\alpha$ : -10.8	LXR $\alpha$ : -7.2
LXR $\beta$	LXR $\beta$ : -8.3	LXR $\beta$ : -10.8	LXR $\beta$ : -5.1
PPAR $\alpha$	PPAR $\alpha$ : -9.1	PPAR $\alpha$ : -8.7	PPAR $\alpha$ : -9.9
PPAR $\beta$	PPAR $\beta$ : -6.9 PC+	PPAR $\beta$ : -9.0	PPAR $\beta$ : -10.4
PPAR $\gamma$	PPAR $\gamma$ : -8.1	PPAR $\gamma$ : -9.0	PPAR $\gamma$ : -10.5
RXR $\alpha$	RXR $\alpha$ : -10.9	RXR $\alpha$ : -10.6	RXR $\alpha$ : -2.9
TR $\alpha$	TR $\alpha$ : -2.2	TR $\alpha$ : -5.7	TR $\alpha$ : 11.6
TR $\beta$	TR $\beta$ : -7.3 PC+	TR $\beta$ : -8.0 CH+	TR $\beta$ : 6.1
ATC	S01JA01 S01JA51	V03AX03	V03AC03