

活性化合物库

包含 40,000 余种活性化合物,适用于药物筛选、细胞诱导、药物功能重定位、机制研究等相关研究领域。

天然产物库

包含 100,000 余种天然产物及天然产物衍生物,适用于侧重天然产物新结构,新活性研究的药物筛选,细胞诱导领域。

类药性化合物库

包含 1,200 万类药小分子,适用于高通量药物筛选、虚拟筛选、创新性药物开发、新药创制等方向。

片段库

数万种 Fragment 的集合,可提供高溶解性片段、共价片段、含氟片段等多种类型的片段分子,满足各类 FBDD 研究需求。

COMPOUND LIBRARY

陶术生物 · 化合物库目录



☎ 400-821-0310

☎ 021-3469-2979

📍 上海市静安区江场三路 238 号 8 楼

✉ sales@tsbiochem.com

🌐 www.tsbiochem.com

* 陶术生物的所有产品和服务仅用于科学研究,我们不为任何其他用途提供产品和服务。

具体价格数量信息请以官网为准。

关于我们

ABOUT US

上海陶术生物科技有限公司是一家致力于服务全球用户的高新技术企业，深耕化合物筛选领域十余年，旗下 TOPSCIENCE（陶术生物）品牌立足于多年积累的行业经验，与全球知名高校和科研院所的专业学者建立了紧密的合作关系，为各类创新药物的研发提供便捷的一站式采购体验。

- 1,200 万种实体化合物供应
- 800 多种特色小分子筛选库
- 2 万种活性生化试剂小分子
- CADD、生测等药物筛选服务
- 特色药物筛选仪器及耗材



一、热门活性化合物库

适用于药物筛选、细胞诱导、药物功能重定位、机制研究、靶点确认以及阳性对照等相关研究领域。

1.1 通用已知活性库

上市药物库	02
经典已知活性库	03
已知活性库	03
FDA 上市药物库	04

1.2 上市状态分类

FDA 上市及药典收录分子库	05
临床期小分子药物库	06
临床前化合物库	06
NMPA 中国上市药物库	07
药物功能重定位化合物库	07

1.3 疾病类型分类

抗癌上市药物库	08
抗病毒库	08

抗癌化合物库	09
抗代谢疾病化合物库	09
抗乳腺癌化合物库	10
抗感染化合物库	11
抗糖尿病库	11
免疫/炎症分子化合物库	12
抗心血管疾病化合物库	12
抗肺癌化合物库	13

1.4 通路靶点分类

表观遗传库	14
激酶抑制剂库	14
离子通道库	15
蛋白酶抑制剂库	15
GPCR 靶点分子库	16
DNA 损伤和修复分子库	17

细胞凋亡化合物库	17
自噬库	18
酪氨酸激酶分子库	18
铁死亡化合物库	19

1.5 特色活性库

核苷酸类化合物库	19
内分泌激素分子库	20
组蛋白修饰化合物库	21
抗生素库	21
活性脂质化合物库	22
干细胞分化化合物库	22
抗衰老化合物库	23
PPI 抑制剂库	23
共价抑制剂库	24
表型筛选靶点鉴定库	25

二、热门天然产物库

适用于侧重天然产物新结构，新活性研究的药物筛选，细胞诱导领域。

2.1 高通量筛选天然产物库

天然产物库	25
高通量筛选天然产物库	26

2.2 虚拟筛选天然产物库

天然产物单体化合物库	27
天然产物衍生物虚筛数据库	27

2.3 天然产物衍生物库

天然产物衍生物库	28
----------	----

2.4 特色天然产物库

人内源代谢化合物库	28
植物来源化合物库	29
天然多酚类化合物库	30

药食同源库	30
中国药典收录天然产物库	31
抗癌天然产物库	31
中药抗炎分子库	32
稀有天然产物库	33
天然产物共价库	33
中药单体化合物库	34

三、热门类药性化合物库

适用于高通量药物筛选，虚拟筛选，创新性药物开发，新药创制等方向。

3.1 高通量/高内涵化合物库

BMS 代表性核心库	34
Pre 多样性库	35
药物靶点库	35

Mini 骨架库	36
Golden 骨架库	36
多样性核心库	36
多样性核心预制库	36

3.2 按潜在疾病分类

按潜在疾病分类	37
---------	----

3.3 按潜在通路靶点分类

按潜在通路靶点分类	38
-----------	----

3.4 特色多样性化合物库

特色多样性化合物库	43
-----------	----

四、热门片段库

适用于基于片段的筛选和药物发现。

4.1 通用片段库

精选片段库	44
高溶解性片段库	44

4.2 特色片段库

高溶解性多官能团片段库	46
-------------	----

高溶解性微型片段库	47
高溶解性片段药效团库	47
高溶解性卤化片段库	48
高溶解性 3D 结构多样性片段库	48
Mini 片段亲电杂环库	49
药物片段库	49

4.3 NMR 和晶体片段库

NMR 和晶体片段库	50
------------	----

4.4 共价片段库

共价片段库	50
-------	----

随货提供的文件

Excel: 详细记录化合物除结构式以外的参数;

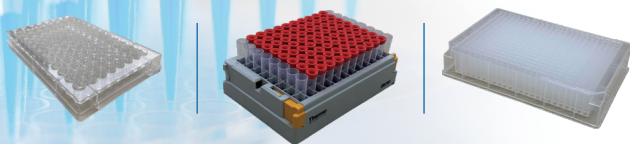
SDF: 可查看化合物的结构式, 建议使用软件为 discovery studio;

检测谱图和说明书;

化合物的 COA、Datasheet 和谱图。

常用耗材

保存方式	96 细胞培养板	96 深孔板	384 孔板
规格	≤50μl	>50μl	依客户需求
型号	V Shape, PP, 0.36mL	V Bottom, PP, 2D barcoded, SepraSeal Cap, 1.4mL	V Shape, PP, 0.24mL
溶液形式	10mM DMSO		
保存温度	-20°C (短期保存) -80°C (长期保存)		



通用已知活性库

上市药物库 —— 2,863 个小分子

L1000

传统的药物开发涉及从头确认和验证新分子实体, 这是一个耗时且成本高昂的过程, 随着对药物安全性及有效性的要求不断提高, 开发新药的成本还将持续上涨。由于时间和成本大幅降低, 近年来药物功能重定位受到越来越多关注, 高内涵筛选、新的生物标志物发现和生物信息学的快速发展为基于靶点或细胞的药物重定位创造了机会。

上市药物都具有已知的和良好表征的生物活性、安全性和生物利用度, 这些特征可以显著加速药物开发和优化, 从上市药物中筛选出的苗头化合物将为后续的药物优化计划提供有利的线索。

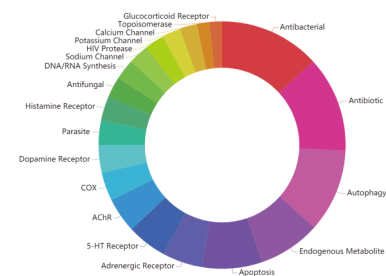
此外, 由于活性明确, 靶点已知, 很多科学家会从上市药物库中选择可以用于细胞诱导分化的小分子, 通过单一或几个小分子的联合作用, 选择出将各种体细胞诱导成为诱导多能干细胞、神经前体细胞、心肌细胞等, 甚至还有使用小分子组合在体内完成诱导分化的成功尝试。

为了保证客户的使用效果, 我们把适合于干粉形式提供的产品设置为 Part B, 尽可能增加新的药物筛选机会, 增加成功筛选到目标分子的几率。

◎ 化合物库规格及组成

PACK SIZE

1 mg
30 μL * 10 mM (in DMSO)
100 μL * 10 mM (in DMSO)
250 μL * 10 mM (in DMSO)

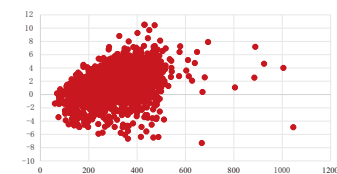


◎ 类药性参数分析

% of compounds compliant with Lipinski's Rules

PhysChem Properties	% Compounds
<5 HBond donors	88
<10 HBond acceptors	90
cLogP<5	90
MW<500	79

cLogP vs MW



经典已知活性库 —— 11,585 个小分子

L4000

经典已知活性库是 11,585 个具有生物活性,能引起细胞、组织甚至个体生物学反应的化合物的集合。包括了正在进行临床前研究的药物分子,临床期的药物分子和已经上市的药物。靶点明确,信息全面,非常适合完成药物功能重定位、小分子诱导细胞分化以及机制研究中蛋白靶点确认等科研工作。

由于活性明确,靶点已知,很多科学家会从已知活性库中选择可以用于细胞诱导分化的小分子;通过单一或几个小分子的联合作用,筛选出能将各种体细胞诱导成为诱导多能干细胞,神经前体细胞,心肌细胞等的分子;甚至还有使用小分子组合在体内完成诱导分化的成功尝试。

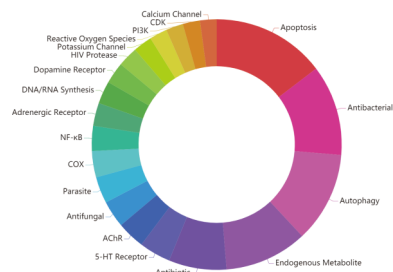
为了保证客户的使用效果,我们把适合于干粉形式提供的产品设置为 Part B,尽可能增加新的药物筛选机会,增加成功筛选到目标分子的几率。

包含 L4000 已知活性库在内,TargetMol 可以提供多达 4 万种生物活性已知的小分子化合物,可以满足您在各个阶段的科研工作需要,欢迎随时和我们联系。

◎ 化合物库规格及组成

PACK SIZE

1 mg
30 μ L * 10 mM (in DMSO)
100 μ L * 10 mM (in DMSO)
250 μ L * 10 mM (in DMSO)



已知活性库 —— 19,703 个小分子

L4010

已知活性库是 19,703 个具有生物活性,能引起细胞、组织甚至个体生物学反应的化合物的集合。包括了正在进行临床前研究的药物分子,临床期的药物分子和已经上市的药物。靶点明确,信息全面,非常适合完成药物功能重定位、小分子诱导细胞分化以及机制研究中蛋白靶点确认等科研工作。

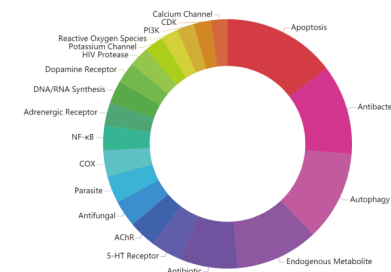
由于活性明确,靶点已知,很多科学家会从已知活性库中选择可以用于细胞诱导分化的小分子;通过单一或几个小分子的联合作用,筛选出能将各种体细胞诱导成为诱导多能干细胞,神经前体细胞,心肌细胞等的分子;甚至还有使用小分子组合在体内完成诱导分化的成功尝试。

已知活性库是对经典已知活性库的补充,添加了 TargetMol 特有,新颖的化合物 (Part C),所有化合物靶点明确,且都进行过细胞水平活性测试,比上市药物库结构更为新颖,比类药化合物库更易发现活性化合物。为了保证客户的最佳使用效果,我们把适合于干粉形式提供的产品设置为 Part B,尽可能增加新的药物筛选机会,增加成功筛选到目标分子的几率。

◎ 化合物库规格及组成

PACK SIZE

1 mg
30 μ L * 10 mM (in DMSO)
100 μ L * 10 mM (in DMSO)
250 μ L * 10 mM (in DMSO)



FDA 上市药物库 —— 1,729 个小分子

L4200

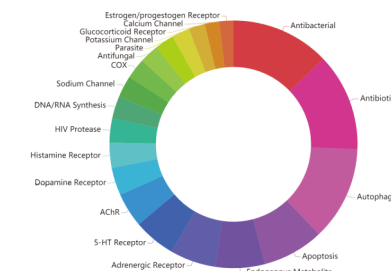
FDA 上市药物库中的所有化合物都具有良好的生物活性、明确的靶点信息,较好的安全性和生物利用度,这些特性可显著加速药物开发和优化,是进行小分子细胞诱导分化和药物重定位理想的工具。详尽的数据资料可以帮助科学家快速完成药物筛选或细胞诱导机制的判断,并为深入揭示其机制机理创造条件。

此外,我们把适合于干粉形式提供的产品设置为 Part B,尽可能增加新的药物筛选机会,增加成功筛选到目标分子的几率。

◎ 化合物库规格及组成

PACK SIZE

1 mg
30 μ L * 10 mM (in DMSO)
100 μ L * 10 mM (in DMSO)
250 μ L * 10 mM (in DMSO)

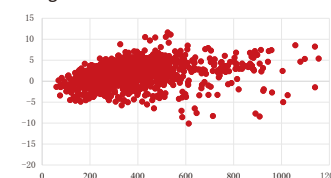


◎ 类药性参数分析

% of compounds compliant with Lipinski's Rules

PhysChem Properties	% Compounds
<5 HBond donors	89
<10 HBond acceptors	89
cLogP<5	90
MW<500	80

cLogP vs MW



上市状态分类



FDA 上市及药典收录分子库 — 3,158 个小分子

L1010

传统的药物开发涉及从头确认和验证新分子实体，这是一个耗时且成本高昂的过程，随着对药物安全性及有效性的要求不断提高，开发新药的成本还将持续上涨。由于时间和成本大幅降低，近年来药物功能重定位受到越来越多关注，高内涵筛选、新的生物标志物发现和生物信息学的快速发展为基于靶点或细胞的药物重定位创造了机会。

上市药物都具有已知的和良好表征的生物活性、安全性和生物利用度，这些特征可以显著加速药物开发和优化，从上市药物中筛出的苗头化合物将为后续的药物优化计划提供有利的线索。此外，由于活性明确，靶点已知，很多科学家会从上市药物库中选择可以用于细胞诱导分化的小分子，通过单一或几个小分子的联合作用，选择出将各种体细胞诱导成为诱导多能干细胞、神经前体细胞、心肌细胞等，甚至还有使用小分子组合在体内完成诱导分化的成功尝试。

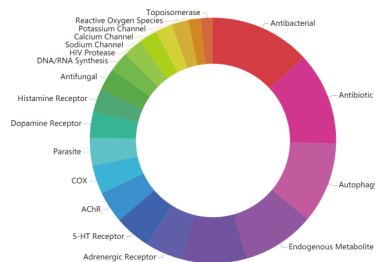
TargetMol FDA 上市及药典收录分子库收集了 3,158 个 FDA、EMA、PMDA、NMPA 等多个国家药监局批准上市的药物以及 USP、EP、BP、JP、CP 等药典收录的药物分子，可用于老药新用及细胞诱导。

此外，为了保证客户的使用效果，我们把适合于干粉形式提供的产品设置为 Part B，尽可能增加新的药物筛选机会，增加成功筛选到目标分子的几率。

◎ 化合物库规格及组成

PACK SIZE

1 mg
30 μ L * 10 mM (in DMSO)
100 μ L * 10 mM (in DMSO)
250 μ L * 10 mM (in DMSO)



临床期小分子药物库 — 3,142 个小分子

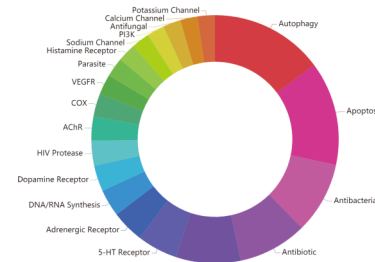
L3400

临床期小分子药物库汇集了 3,142 个已经进入临床实验的化合物，这些化合物经过大量的临床前研究实验，具有活性高、毒性低和机制明确的特点。我们随货信息中每个化合物都包含了其作用靶点、临床期、适应症等信息，涉及癌症、炎症、感染、神经病、心血管病和消化系统疾病等多种热门病症，以及 JAK、EGFR、mTOR、CDK、HDAC、Akt、PARP 等众多成药靶点，适用于药物筛选的同时，也是细胞诱导分化的有力工具。

◎ 化合物库规格及组成

PACK SIZE

1 mg
30 μ L * 10 mM (in DMSO)
100 μ L * 10 mM (in DMSO)
250 μ L * 10 mM (in DMSO)



临床前化合物库 — 709 个小分子

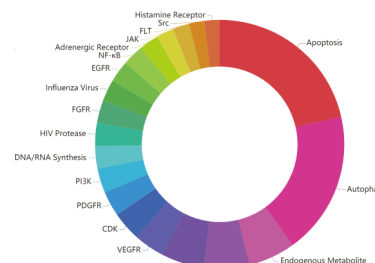
L3410

709 种临床前小分子化合物的特有集合，用于高通量、高内涵筛选；拥有明确的靶点信息；有详细的临床分期和适应症信息；是新药研发过程中的热门先导化合物；结构多样，药效显著，可渗透细胞；可用于高通量、高内涵筛选。

◎ 化合物库规格及组成

PACK SIZE

1 mg
30 μ L * 10 mM (in DMSO)
100 μ L * 10 mM (in DMSO)
250 μ L * 10 mM (in DMSO)



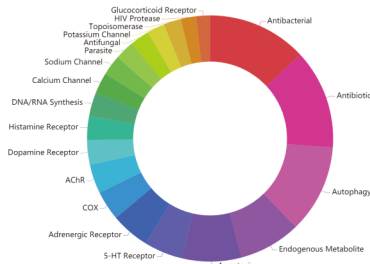
NMPA中国上市药物库 — 1,319 个小分子

L4210

NMPA 中国上市药物库汇集了 1,319 个中国国家药品监督管理局批准的化合物,所有化合物通过临床验证,靶点明确,具有较好的安全性和生物利用度,是进行老药新用理想的工具,可以大大提高药物研发的成功率,能够缩短药物研发周期,节约研发成本。

● 化合物库规格及组成

PACK SIZE
1 mg
30 μ L * 10 mM (in DMSO)
100 μ L * 10 mM (in DMSO)
250 μ L * 10 mM (in DMSO)



药物功能重定位化合物库 — 4,240 个小分子

L9200

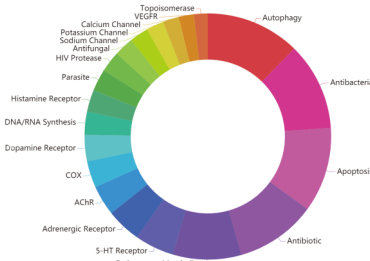
传统的药物开发涉及从头确认和验证新分子实体,这是一个耗时且成本高昂的过程,随着对药物安全性及有效性的要求不断提高,开发新药的成本还将持续上涨。由于时间和成本大幅降低,近年来药物功能重定位受到越来越多关注,高内涵筛选、新的生物标志物发现和生物信息学的快速发展为基于靶点或细胞的药物重定位创造了机会。

TargetMol 药物功能重定位化合物库收集了 4,240 种已上市和进入临床期的药物,这些化合物经过大量的临床前研究实验,具有活性高、毒性低和机制明确的特点,适用于药物筛选的同时,也是细胞诱导分化的有力工具。

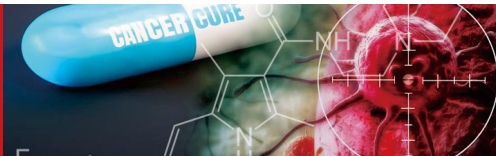
此外,我们把适合于干粉形式提供的产品设置为 Part B,尽可能增加新的药物筛选机会,增加成功筛选到目标分子的几率。

● 化合物库规格及组成

PACK SIZE
1 mg
30 μ L * 10 mM (in DMSO)
100 μ L * 10 mM (in DMSO)
250 μ L * 10 mM (in DMSO)



疾病类型分类



抗癌上市药物库 — 1,726 个小分子

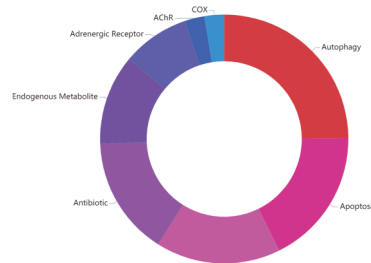
L2110

尽管在过去的几十年中癌症的研究和治疗取得了巨大的成功,但癌症仍然是人类面临的巨大挑战,给患者身心健康带来巨大的痛苦。癌细胞具有许多显著不同的生物学特征,表现出无限的增殖潜能,维持自身生长信号的持续稳定,逃避应激信号诱导的细胞凋亡,刺激血管生长,为肿瘤提供营养,同时逃避免疫系统防御和诱导局部慢性炎症,发挥其侵袭和转移能力,表现出异常的代谢活动,并通过突变和表观遗传机制显著改变全基因组的稳定性。

根据文献报道和有关公开资料,我们挑选了 1,726 个具有抗癌活性或潜在抗癌活性的上市药物组成抗癌上市药物库,可用于具体癌症的阳性对照及不同癌症之间相关性研究。如果您对癌症相关适应症感兴趣,还可以关注我们其他三个库:抗癌分子库,癌细胞分化分子库,以及抗癌临床药物库。希望我们在抗癌研究的路上,助您一臂之力!

● 化合物库规格及组成

PACK SIZE
1 mg
30 μ L * 10 mM (in DMSO)
100 μ L * 10 mM (in DMSO)
250 μ L * 10 mM (in DMSO)



抗病毒库 — 800 个小分子

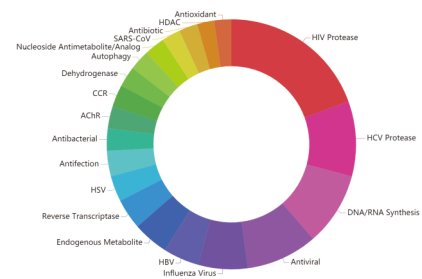
L1700

病毒可以通过多种传播途径侵入机体,在宿主细胞中增殖,并造成宿主损伤,常见的疾病包括流感、水痘和疱疹等,而艾滋病、脊髓灰质炎等疾病则分别是由 HIV、poliovirus 引起的严重并危及生命的病毒感染。

TargetMol 抗病毒库包含 800 种具抗病毒活性的化合物,是医药研发和科研的有效载体。同时,由于病毒的变种很多,模型相对简单,非常适合用药物功能重定位的方法来发现新的抗病毒药物,所以您如果从事抗病毒研究,非常推荐您使用我们的上市药物库进行药物功能的重定位。

● 化合物库规格及组成

PACK SIZE
1 mg
30 μ L * 10 mM (in DMSO)
100 μ L * 10 mM (in DMSO)
250 μ L * 10 mM (in DMSO)



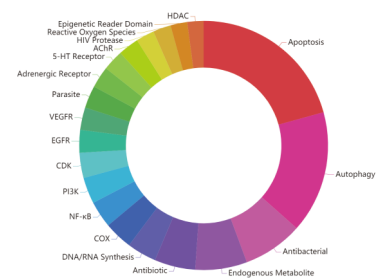
抗癌化合物库 —— 5,885 个小分子
L2100

在过去的几十年中癌症的研究和治疗取得了巨大的成功,但癌症仍然是人类面临的巨大挑战,给患者身心健康带来巨大的痛苦。癌细胞具有许多显著不同的生物学特征,表现出无限的增殖潜能,维持自身生长信号的持续稳定,逃避应激信号(例如治疗药物)诱导的细胞凋亡,刺激血管生长,为肿瘤提供营养,同时逃避免疫系统防御和诱导局部慢性炎症,发挥其侵袭和转移能力,表现出异常的代谢活动,并通过突变和表观遗传机制显著改变全基因组的稳定性。

我们根据上述癌细胞显著不同的特征和异常的代谢活动,精心筛选了 5,885 个肿瘤相关的小分子化合物,这些化合物都是调节肿瘤细胞代谢、增殖、侵袭、转移通路上的小分子,可用于肿瘤相关研究以及抗肿瘤药物的筛选,可用于高通量、高内涵筛选。

● 化合物库规格及组成

PACK SIZE
1 mg
30 μ L * 10 mM (in DMSO)
100 μ L * 10 mM (in DMSO)
250 μ L * 10 mM (in DMSO)



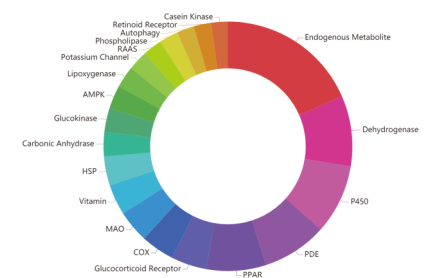
抗代谢疾病化合物库 —— 1,558 个小分子
L5200

代谢是指一组负责将碳水化合物、脂类和蛋白质转化为能量的生化反应,是维持内环境稳态的一个基本过程。

代谢领域研究的重点是调节代谢的基本生物学机制及其在肥胖、糖尿病、心血管疾病和癌症等疾病中的作用。TargetMol 是全球知名的化合物库供应商,积极关注科研动态,为您提供大量代谢疾病研究相关的优质产品,为您的研究或相关药物筛选提供支持。

● 化合物库规格及组成

PACK SIZE
1 mg
30 μ L * 10 mM (in DMSO)
100 μ L * 10 mM (in DMSO)
250 μ L * 10 mM (in DMSO)



抗乳腺癌化合物库 —— 1,436 个小分子
L2191

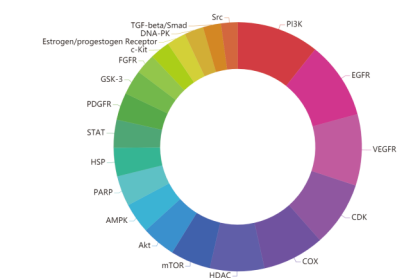
乳腺癌是乳腺恶性肿瘤,是全球女性发病率第一的癌症,约占女性癌症患者的 20%,也是 100 多个国家癌症死亡的主要原因。近年来全球乳腺癌发病率一直呈上升趋势。

乳腺癌根据病理分型可分为非浸润性癌,早期浸润性癌,浸润性癌。根据分子分型可分为雌激素受体阳性乳腺癌 (ER+PR+HER2-), HER2 阳性乳腺癌 (ER-PR-HER2+), 三阴性乳腺癌 (ER-PR-HER2-)。不同类型的乳腺癌,从治疗方法到预后都是非常不同,需要针对已经明确的致癌位点,探索相关靶点来设计相应的药物。

TargetMol 抗乳腺癌库收集了 1,436 种与乳腺癌相关的化合物,包含了已经报道的有乳腺癌治疗作用的化合物,以及相关的靶点通路 (HER-2, VEGF, EGFR, PARP, CDK4/6, HSP, PD-1, SET7/9, BRCA 等),是乳腺癌药物研发的良好工具。

● 化合物库规格及组成

PACK SIZE
1 mg
30 μ L * 10 mM (in DMSO)
100 μ L * 10 mM (in DMSO)
250 μ L * 10 mM (in DMSO)



抗感染化合物库 —— 2,977 个小分子

L1800

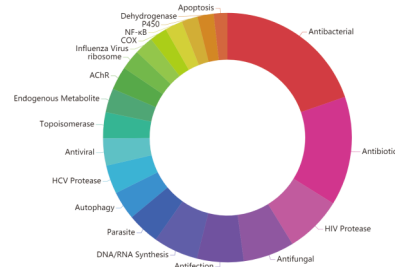
当外来生物进入人体并造成伤害时就会发生感染, 这些引起感染的外来生物称为病原体, 例如细菌、病毒、真菌和寄生虫等。有些感染是轻微的几乎不可察觉, 但有些感染严重甚至危及生命, 且对治疗有抵抗力。

针对上述情况, TargetMol精选了 2,977 种具有抗菌、抗病毒以及抗寄生虫等抗感染活性的化合物的组成抗感染化合物库, 以用于抗感染研究中的药物高通量筛选、确认药物靶点以及其他医药研发和科研领域。

◎ 化合物库规格及组成

PACK SIZE

1 mg
30 μ L * 10 mM (in DMSO)
100 μ L * 10 mM (in DMSO)
250 μ L * 10 mM (in DMSO)



抗糖尿病库 —— 690 个小分子

L1900

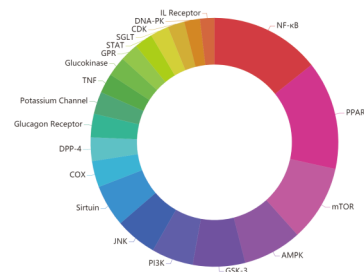
糖尿病是一种以高血糖为特征的代谢性疾病, 长期的高血糖会导致全身各种组织功能障碍, 如果出现并发症, 糖尿病会对生活质量产生重大影响, 并可能降低预期寿命, 目前仍然无法治愈糖尿病, 只能通过饮食调节和药物辅助治疗进行病情控制。

TargetMol 抗糖尿病库包含了 690 个糖尿病相关活性化合物, 是研究糖尿病的良好工具和药物筛选的极佳载体。

◎ 化合物库规格及组成

PACK SIZE

1 mg
100 μ L * 10 mM (in DMSO)
250 μ L * 10 mM (in DMSO)



免疫/炎症分子化合物库 —— 3,483 个小分子

L4700

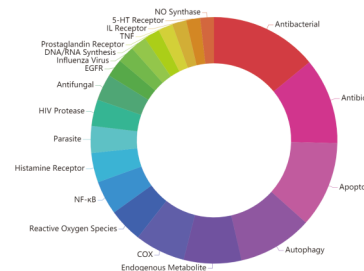
当某些触发因素引起免疫系统功能紊乱, 使其不能区分正常组织和病原, 开始攻击破坏自身正常组织时, 就会发生自身免疫性疾病, 受累部位包括血管、结缔组织、关节和皮肤等。随着 19 - 20 世纪的化学进展, 开发了非甾体抗炎药 (NSAIDs), 尽管有效治疗炎症性疾病, 但 NSAID 具有一些不良作用, 例如溃疡、肾损伤和胃肠道出血。后来虽然最初被描述为抗肿瘤介质, 但肿瘤坏死因子 - α (TNF) 通常被认为是主要的促炎细胞因子。它在炎症性疾病的发病机制中起关键作用, 因此, 抗 TNF 治疗已成为治疗自身免疫性疾病的主要方法。随着基础研究的快速进展, 许多与自身免疫性疾病相关的信号传导途径及相关蛋白陆续被发现, 这些蛋白是潜在治疗免疫性疾病的药物靶点, 例如, 很多小分子化合物或基于大环的药物具有抑制免疫蛋白酶体、抑制核输出蛋白、抑制 NF - κ B 和肿瘤坏死因子 - α (TNF) 的活性, 这些化合物有可能发展成用于治疗自身免疫疾病和慢性炎症性疾病的药物。

TargetMol 免疫/炎症分子化合物库包含了 3,483 个抗炎活性化合物, 用于自身免疫疾病药物高通量筛选, 确认药物靶点以及其他医药研发和科研领域。

◎ 化合物库规格及组成

PACK SIZE

1 mg
30 μ L * 10 mM (in DMSO)
100 μ L * 10 mM (in DMSO)
250 μ L * 10 mM (in DMSO)



抗心血管疾病化合物库 —— 1,428 个小分子

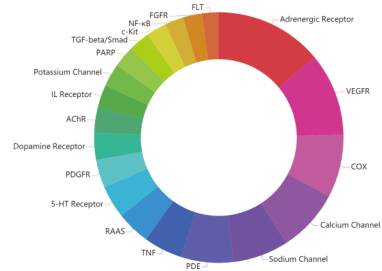
L5400

心血管疾病泛指由于动脉粥样硬化、高脂血症、血液黏稠、高血压等所导致的心脏、大脑及全身组织发生的缺血性或出血性疾病, 例如心绞痛、心肌梗塞、中风等, 是全球死亡的首要原因。不同类型疾病的发病机制不同, 各种抗氧化、抗高血脂、抗缺血、抑制血小板聚集和抗炎物质都具有降低心血管疾病风险的作用。某些天然产物具有抑制粘附分子、细胞因子和趋化因子基因表达, 抑制血小板功能, 增强内皮细胞一氧化氮释放, 抑制平滑肌活化的作用, 这些化合物都是心血管疾病药物筛选中的重要工具。

TargetMol 抗心血管疾病化合物库是由 1,428 个心血管疾病相关的化合物组成的综合筛选库, 用于心血管疾病的相关研究和高通量高内涵筛选。

◎ 化合物库规格及组成

PACK SIZE
1 mg
30 μ L * 10 mM (in DMSO)
100 μ L * 10 mM (in DMSO)
250 μ L * 10 mM (in DMSO)



抗肺癌化合物库 —— 1,566 个小分子

L2190

根据《2018年全球癌症统计数据》报告,仅2018年,全球新增癌症病例1810万,死亡960万,其中亚洲占近70%,肺癌依旧排在发病率及死亡率的第一位(11.6%及18.4%)。肺癌已经成为发病率和死亡率增长最快,对人群健康和生命威胁最大的恶性肿瘤之一。

由于缺乏有效的治疗手段,目前肺癌的治疗目标是延长生存期,尽可能长时间地实现和维持良好的生活质量。肺癌的治疗手段包括手术、放疗、化疗、免疫治疗或联合疗法。近年来,靶向治疗和肿瘤免疫疗法成为肺癌治疗的重要发展方向,并且取得了较好的治疗效果。但是靶向药物治疗易出现耐药性的问题,随着靶向药物的不断发展、全基因组测序的不断推进,开发新一代克服耐药的靶向治疗药物是肺癌药物开发的重中之重。

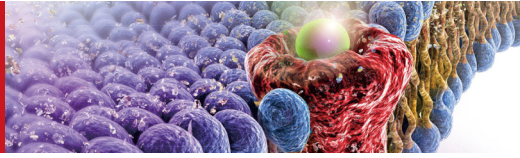
TargetMol 抗肺癌化合物库收集了 1,566 种与肺癌相关的化合物,包括已经报道有肺癌治疗作用的化合物,以及靶向肺癌相关靶点的化合物,是抗肺癌药物研发的良好工具。此外,我们还提供已知活性库、上市药物库、天然产物库以及一系列抗癌相关化合物库,可以用于抗癌药物的研发,如果您感兴趣,欢迎与我们联系~

◎ 化合物库规格及组成

PACK SIZE
1 mg
30 μ L * 10 mM (in DMSO)
100 μ L * 10 mM (in DMSO)
250 μ L * 10 mM (in DMSO)



通路靶点分类



表观遗传库 —— 960 个小分子

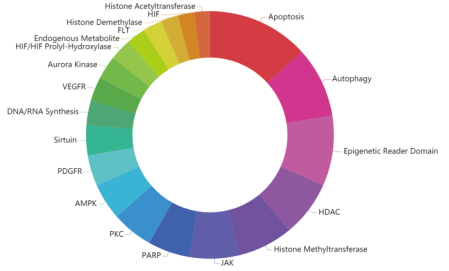
L1200

表观遗传学主要研究“表观遗传现象”的机制,包括:基因选择性转录的调控,有 DNA 甲基化、基因印记、组蛋白共价修饰和染色体重塑;和基因转录后的调控,有基因组中非编码 RNA、微小 RNA、反义 RNA、内含子及核糖开关等。表观遗传具有解释老化机制、人类发育和癌症起源等疾病的潜力。例如,文献报道原癌基因区的表观遗传控制和肿瘤抑制序列可通过组蛋白构象变化而直接影响癌症的形成和进展。

TargetMol 表观遗传库收集 960 种表观遗传相关的活性小分子,适用于表观遗传学研究,可用于高通量、高内涵筛选。

◎ 化合物库规格及组成

PACK SIZE
1 mg
30 μ L * 10 mM (in DMSO)
100 μ L * 10 mM (in DMSO)
250 μ L * 10 mM (in DMSO)



激酶抑制剂库 —— 2,230 个小分子

L1600

在生物化学中,激酶是一类从高能供体分子(如 ATP)转移磷酸基团到特定靶分子的酶;这一过程谓之磷酸化。比较常见的激酶族群是蛋白激酶,蛋白激酶作用于特定的蛋白质,使其磷酸化而改变其活性。这些激酶在细胞的信号转导及其复杂的生命活动中起了广泛的作用。其他不同的激酶作用于小分子物质(脂质、糖、氨基酸、核苷等),或者为了发出信号,或者使它们为代谢中各种生化反应作好准备。

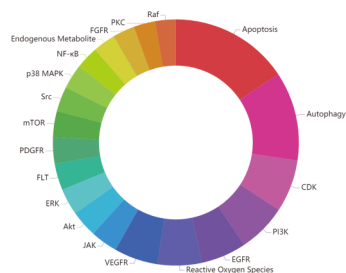
TargetMol 激酶抑制剂库含有 2,230 种具有明确激酶抑制活性的小分子化合物,这些抑制剂作用的激酶包括: Insulin/IGF Receptors、PI 3-Kinase、CaM Kinase II、JAK、PKA、CDK、JNK、PKC、CKI II、MAPK、RAF、EGFR、MEK、SAPK、GSK、MLCK、Src-family、IKK、PDGFR、VEGFR等。该库是化学基因组学和药理学研究的理想工具。

活性化合物库

◎ 化合物库规格及组成

PACK SIZE

1 mg
30 μ L * 10 mM (in DMSO)
100 μ L * 10 mM (in DMSO)
250 μ L * 10 mM (in DMSO)



离子通道库 —— 946 个小分子

L2300

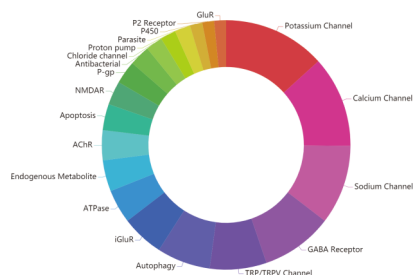
离子跨膜通道的调节是治疗多种疾病的基础，离子通道是开发新的高效药物治疗的重要靶点，随着人类基因组计划的完成和转录机制研究的深入，离子通道分布的组织特异性逐渐得以阐明，这将使离子通道成为一类有选择性的组织特异性药物靶点。离子通道对于细胞间通讯至关重要，并调节多种重要的生理过程，这些过程功能障碍，可导致广泛的疾病和病理状况，如糖尿病、神经性疼痛、心血管疾病、大脑和周围血管疾病、哮喘、神经退行性疾病。

为满足客户离子通道相关研究的化合物需求，我们根据文献报道和其他公开资料精心整理 496 种与离子通道相关的生物活性小分子化合物，适用于离子通道相关的疾病和药物研究。

◎ 化合物库规格及组成

PACK SIZE

1 mg
30 μ L * 10 mM (in DMSO)
100 μ L * 10 mM (in DMSO)
250 μ L * 10 mM (in DMSO)



蛋白酶抑制剂库 —— 344 个小分子

L1100

蛋白酶抑制剂包括蛋白质类蛋白酶抑制剂和其他天然小分子类蛋白酶抑制剂，具有多种生物活性：(1) 抗病虫害侵袭。蛋白酶抑制剂可以与昆虫体内消化道中的蛋白酶作用形成酶-抑制剂复合物，干扰其正常代谢进而导致其死亡。(2) 免疫调节与抗炎作用。蛋白酶抑制剂具有免疫调节特性。蛋白酶抑制剂也可抑制与炎症有关的蛋白酶如组织蛋白酶 G 和弹性蛋白酶等而发挥抗炎作用。(3) 抗氧化作用。蛋白酶抑制剂能通过抑制炎症

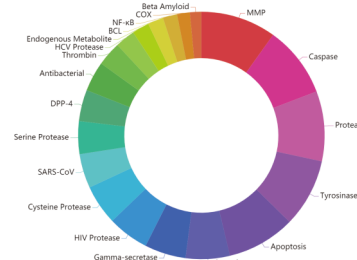
反应而降低自由基的产生。多酚类化合物还具有直接和间接清除自由基的能力，表现出广泛的抗氧化作用。(4) 抑制肿瘤作用。蛋白酶抑制剂能抑制蛋白质的水解而限制肿瘤生长所需的过量氨基酸；阻止癌细胞的侵袭和转移；抑制肿瘤血管新生，影响肿瘤细胞生长，并诱导肿瘤细胞凋亡。(5) 保护心血管作用。一氧化氮是调节血管平滑肌收缩的关键分子。蛋白酶抑制剂能促进一氧化氮的释放而对心血管系统起保护作用。

TargetMol 蛋白酶抑制剂库是 344 种已知的小分子蛋白酶抑制剂的集合，可用于化学基因组学相关研究和药物筛选。

◎ 化合物库规格及组成

PACK SIZE

1 mg
30 μ L * 10 mM (in DMSO)
100 μ L * 10 mM (in DMSO)
250 μ L * 10 mM (in DMSO)



GPCR 靶点分子库 —— 1,633 个小分子

L1500

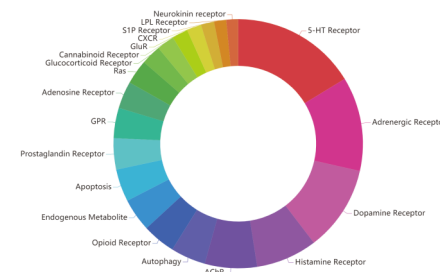
G 蛋白偶联受体 (GPCR) 的超家族是对真核细胞信号传导至关重要的多种跨膜蛋白。GPCR 启动细胞对各种胞外介质的反应，参与几乎所有常见的人类疾病。近 40% 的上市药物通过调节 GPCR 功能起作用，70% 的在研治疗新方法靶向 GPCR，此外，数百个“孤儿”GPCR（尚未鉴定出天然配体）是许多药物发现计划中研究的焦点。GPCR 靶向候选药物必须是对靶蛋白具有高亲和、特异性和合理的膜渗透性。

TargetMol GPCR 靶向化合物库是由 1,633 种与 G 蛋白及其耦联受体相关的生物活性小分子化合物的特有集合。用于 GPCR 靶向的药物研发，GPCR 相关科学研究和药物筛选，可用于高通量、高内涵筛选。

◎ 化合物库规格及组成

PACK SIZE

1 mg
30 μ L * 10 mM (in DMSO)
100 μ L * 10 mM (in DMSO)
250 μ L * 10 mM (in DMSO)



DNA 损伤和修复分子库 —— 937 个小分子

L3900

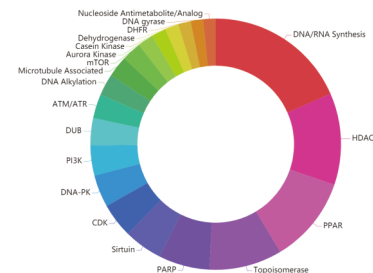
癌细胞的耐药性是癌症治疗过程中面临的主要挑战,因此鉴定新的生物学靶标,并开发设计相应的药物成为重要策略,在各种潜在候选靶标中,癌细胞 DNA Damage & Repair 系统是重要的靶标。由于抗生素的滥用,细菌等微生物的耐药性越来越强,开发靶向微生物 DNA Damage & Repair 系统的药物迫在眉睫。

TargetMol DNA 损伤和修复分子库是 937 个与 DNA 损伤和修复紧密相关的化合物集合,可用于DNA损伤和修复相关研究的高通量筛选,高内涵筛选。

◎ 化合物库规格及组成

PACK SIZE

1 mg
30 μ L * 10 mM (in DMSO)
100 μ L * 10 mM (in DMSO)
250 μ L * 10 mM (in DMSO)



细胞凋亡化合物库 —— 1,797 个小分子

L9000

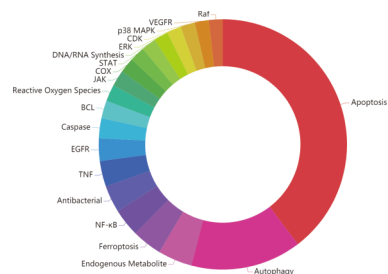
细胞凋亡是一种发生在多细胞生物中的程序性细胞死亡。相对于细胞坏死,细胞凋亡是受基因调控的主动过程,细胞凋亡时会发生特征性的形态学变化,最后产生称为凋亡小体的细胞碎片被吞噬细胞吞噬。细胞凋亡受到促凋亡因子 (Fas 受体和 caspases) 和抑凋亡因子 (Bcl-2 蛋白和 IAP) 的调控,异常凋亡过程牵涉到多种疾病中,细胞凋亡的抑制可导致癌症、自身免疫性疾病、炎症疾病和病毒感染。另一方面,过度的细胞凋亡可能导致神经退行性疾病、血液疾病和组织损伤。目前在细胞凋亡与癌症发生和自身免疫性疾病之间的关系有着很多研究,人们希望激发癌细胞的细胞凋亡,以达到治疗癌症的目的。“细胞凋亡在神经退行性疾病中所扮演的角色 (如阿兹海默氏症、亨丁顿舞蹈症、帕金森病、肌肉萎缩性侧索硬化症),是目前热门的研究领域。”

TargetMol 细胞凋亡化合物库精选 1,797 种与凋亡相关的生物活性小分子化合物,适用于癌症和神经退行性疾病相关研究。

◎ 化合物库规格及组成

PACK SIZE

1 mg
30 μ L * 10 mM (in DMSO)
100 μ L * 10 mM (in DMSO)
250 μ L * 10 mM (in DMSO)



自噬库 —— 1,248 个小分子

L3200

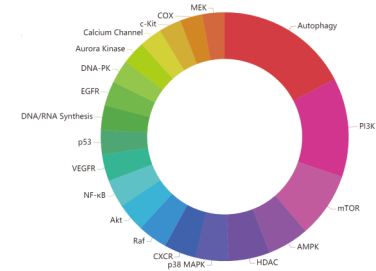
自噬是一个涉及到细胞自身物质或结构被溶酶体或液泡分解的过程。先是内质网脱落的双层膜包裹细胞内部受损或老化的细胞器、蛋白质等成分形成自噬体,后与溶酶体或液泡融合降解其所包裹的内容物,以实现细胞本身的代谢需要和某些细胞器的更新。细胞自噬与细胞凋亡、细胞衰老一样,是十分重要的生物学现象,参与生物的发展、生长等多种过程,细胞自噬的异常导致癌细胞的出现。

TargetMol 自噬库集合了文献报道的 1,248 种细胞自噬相关的生物活性小分子化合物,可用于细胞自噬机理研究和靶向药物筛选。

◎ 化合物库规格及组成

PACK SIZE

1 mg
30 μ L * 10 mM (in DMSO)
100 μ L * 10 mM (in DMSO)
250 μ L * 10 mM (in DMSO)



酪氨酸激酶分子库 —— 747 个小分子

L2200

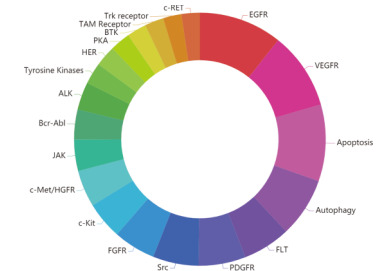
蛋白激酶 (PK) 是正常细胞信号转导的重要介质,通过对底物蛋白的磷酸化来调节它们的活性、定位和整体功能。蛋白激酶参与几乎所有细胞过程的活动,在细胞增殖、血管生成、迁移、细胞周期等过程中发挥关键作用。在众多蛋白激酶中,酪氨酸蛋白激酶 (TK) 可能是癌症治疗较有吸引力的靶点,因为 TK 信号异常通常与肿瘤发生发展密切相关,此外,TK 在炎症和类风湿性关节炎等其他疾病中也起着关键作用。

TargetMol 酪氨酸激酶分子库精选 747 种酪氨酸激酶抑制剂,用于研究酪氨酸激酶相关的疾病和药物,可用于高通量筛选和高内涵筛选。

◎ 化合物库规格及组成

PACK SIZE

1 mg
30 μ L * 10 mM (in DMSO)
100 μ L * 10 mM (in DMSO)
250 μ L * 10 mM (in DMSO)



铁死亡化合物库 —— 800 个小分子

L8700

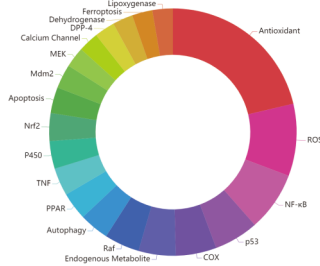
铁死亡 (ferroptosis) 是近年来发现的一种由铁依赖的氧化损伤引起的细胞死亡模式,与凋亡、坏死、自噬不同,铁死亡的特征主要是细胞体积缩小和线粒体膜密度增加,没有典型的细胞凋亡和坏死表现。ferroptosis 与神经系统疾病、肿瘤 (特别是乳腺癌、弥漫性大 B 细胞淋巴瘤)、缺血再灌注损伤、肾损伤、动脉粥样硬化、糖尿病、心脏病等疾病有关,进一步深入研究铁死亡的作用机理,研究其在不同疾病类型中的作用,对寻找相关疾病的治疗靶点、靶向药物的研发具有重要意义。

TargetMol 铁死亡化合物库,收集了 800 种与铁死亡通路相关的化合物,靶点包括 GPX4、ROS、p53、Nrf2 等,另外还包含了铁螯合剂、抗氧化剂等多种类型小分子,助力您铁死亡通路相关的靶点鉴定和药物研发。

化合物库规格及组成

PACK SIZE

1 mg
30 μ L * 10 mM (in DMSO)
100 μ L * 10 mM (in DMSO)
250 μ L * 10 mM (in DMSO)



特色活性库



核苷酸类化合物库 —— 255 个小分子

L1720

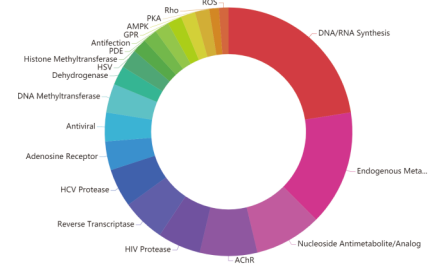
核苷类药物是临床上用于治疗病毒感染性疾病、肿瘤、艾滋病等疾病的一类重要药物。在目前使用的抗病毒药物中,近 50% 是核苷类药物,抗肿瘤药物阿糖胞苷 (Cytarabine)、去氧氟尿苷 (Doxifluridine) 等也属于核苷类。近年来开发研制成功的核苷类药物还有治疗艾滋病的 HIV 逆转录酶抑制剂齐多夫定 (Zidovudine)、双脱氧肌苷 (Didanosine)、扎西他滨 (Zalcitabine)、司他夫定 (Stavudine)、拉米夫定 (Lamivudine);治疗疱疹病毒感染的阿昔洛韦 (Aciclovir)、泛昔洛韦 (Famciclovir);治疗单纯疱疹及脑炎的阿糖腺苷 (Vidarabine) 以及治疗流感、疱疹病毒感染和丙型肝炎的利巴韦林 (Ribavirin) 等。

TargetMol 核苷类化合物库收集了 255 种核苷类化合物,包括核苷酸、核苷酸类似物及衍生物等,其中一些化合物已经进入临床或已经上市,可以用于抗病毒、抗肿瘤、抗真菌、抗抑郁等药物的研发。

化合物库规格及组成

PACK SIZE

1 mg
30 μ L * 10 mM (in DMSO)
100 μ L * 10 mM (in DMSO)
250 μ L * 10 mM (in DMSO)



内分泌激素分子库 —— 813 个小分子

L2400

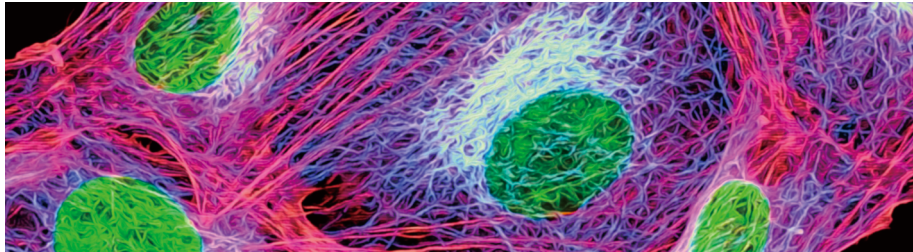
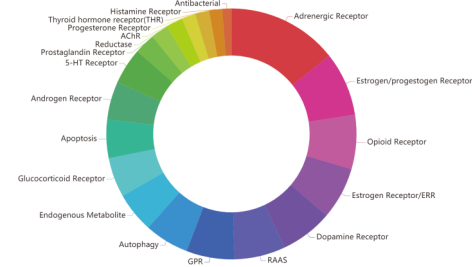
内分泌腺是由一群合成并释放激素的细胞组成,激素随体液输送到靶细胞起作用,调节生长、发育、繁殖和代谢活动,维持内环境的稳态。常见的激素有甲状腺激素、肾上腺素、胰岛素、性激素等,根据化学结构不同,激素通常分为蛋白类、固醇类和氨基酸衍生物,不同激素的受体不同,作用方式不同。内分泌系统的疾病可由激素的过度分泌或分泌不足或目标器官或组织无法有效应对激素引起。

TargetMol 内分泌激素分子库包含 813 个与内分泌系统及其信号通路相关的小分子化合物,用于人体内分泌系统的研究及相关疾病的药物筛选,可用于高通量、高内涵筛选。

化合物库规格及组成

PACK SIZE

1 mg
30 μ L * 10 mM (in DMSO)
100 μ L * 10 mM (in DMSO)
250 μ L * 10 mM (in DMSO)



组蛋白修饰化合物库 —— 362 个小分子

L3500

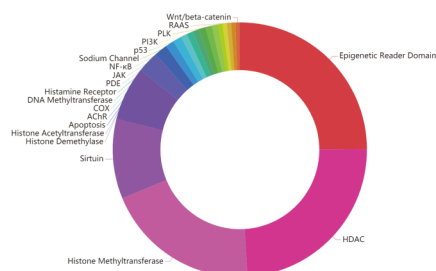
组蛋白修饰 (histone modification) 是指组蛋白在相关酶作用下发生甲基化、乙酰化、磷酸化、腺苷酸化、泛素化、ADP 核糖基化等化学修饰的过程。组蛋白修饰可通过改变染色质结构或募集组蛋白修饰物来影响基因表达, 因此组蛋白修饰在多种生物过程中起作用, 例如转录激活与失活、染色体包装、DNA 损伤与修复等。定量检测各种组蛋白修饰将为更好地理解细胞代谢过程的表现遗传调节提供有用的信息, 促进组蛋白修饰酶靶向药物的发展。

TargetMol 组蛋白修饰化合物库是由 362 个组蛋白修饰研究相关的小分子的独特集合, 用于组蛋白修饰相关的研究以及药物的筛选, 可用于高通量、高内涵筛选。

◎ 化合物库规格及组成

PACK SIZE

1 mg
100 μ L * 10 mM (in DMSO)
250 μ L * 10 mM (in DMSO)



抗生素库 —— 708 个小分子

L4400

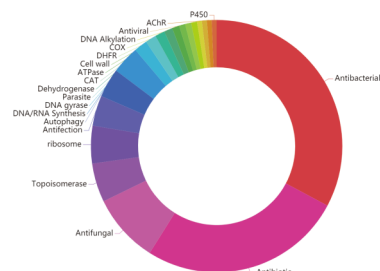
抗生素是对抗感染的强效药物, 挽救了大量患者生命, 抗生素的发现和使用使人类寿命至少延长了 10 年, 因而被称为“20 世纪最伟大的医学发现”, 然而由于抗生素滥用严重, 耐药性的发展速度惊人。抗生素耐药性严重威胁公共健康、经济增长和全球经济稳定, 因此在阻止抗生素滥用的同时, 迫切需要推动研发新的和改造现有的抗生素。

TargetMol 抗生素库是有 708 个具有抗菌生物活性的化合物的集合, 可用于抗生素类药物的筛选和其他相关医药研究。

◎ 化合物库规格及组成

PACK SIZE

1 mg
30 μ L * 10 mM (in DMSO)
100 μ L * 10 mM (in DMSO)
250 μ L * 10 mM (in DMSO)



活性脂质化合物库 —— 385 个小分子

L7000

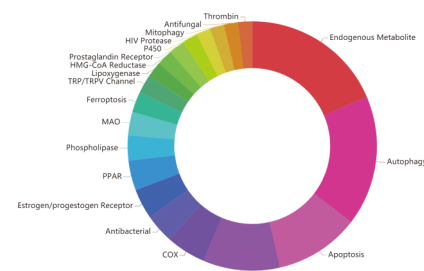
研究表明, 多种脂质分子能够调节组织的脂肪酸构成或诱导细胞信号通路, 具有促进身体健康的作用。除了某些短链或中链脂肪酸以外, 多不饱和脂肪酸 (PUFA) 是重要的生物活性脂质分子, PUFA 大部分来源于植物油, 是合成细胞激素 (二十烷类化合物) 及其他调节人体健康的信号分子的重要前体物质。PUFA 的益处与它们的构型有关, 顺式异构体是主要的生物活性形式, 能够增加膜的流动性, 促进细胞之间的通讯, 维持正常的稳态, 阻止代谢疾病的发展。

TargetMol 为您提供大量活性脂质相关化合物, L7000 包含 385 个脂质相关的小分子化合物抑制剂, 充分满足您的科研需求。

◎ 化合物库规格及组成

PACK SIZE

1 mg
100 μ L * 10 mM (in DMSO)
250 μ L * 10 mM (in DMSO)



干细胞分化化合物库 —— 1,213 个小分子

L8000

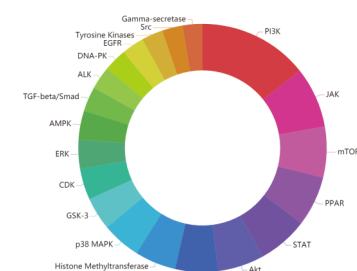
干细胞具有分化成特定细胞亚型的能力, 例如, 胚胎干细胞可以产生所有三个胚层的细胞: 外胚层、中胚层和内胚层。通常认为成体干细胞效力有限, 只能分化成某些细胞类型。为了产生用于再生医学、药物筛选、疾病或发育模型相关的特化细胞类型, 研究人员必须控制和指导干细胞的分化。细胞的分化方向可以通过天然或化学合成的小分子来诱导。例如, 糖原合成酶激酶-3 β 的特异性抑制剂可以诱导多能干细胞中的神经元分化, 特定细胞因子和组蛋白去乙酰化酶抑制剂丁酸钠的组合诱导干细胞分化成肝细胞等。

TargetMol 干细胞分化化合物库是 1,213 种干细胞分化信号通路相关的生物活性小分子化合物的特有集合, 为干细胞相关研究提供有效工具。

◎ 化合物库规格及组成

PACK SIZE

1 mg
30 μ L * 10 mM (in DMSO)
100 μ L * 10 mM (in DMSO)
250 μ L * 10 mM (in DMSO)



抗衰老化合物库 —— 3,324 个小分子

L8200

什么是衰老？衰老是一个由多种因素引起的自然过程。影响生物衰老的因素主要分为两大类：自主调节和损害相关。自主调节依赖特定基因表达，调节机体生长发育过程。损害相关包括内部和环境因素对生物体的损伤作用，损伤理论提出了 9 种衰老在生物体中的代谢“标志”：基因组不稳定性；端粒损耗；表观遗传改变；蛋白质老化；营养能量代谢障碍；线粒体功能障碍；细胞衰老；干细胞耗竭；细胞间通讯改变。

“永葆青春”是人类经久不衰的话题，如何延缓衰老也是科学家广泛关注的课题。TargetMol 的抗衰老化合物库可以为您提供抗衰老研究的利器，这些化合物都已通过前期临床研究和临床实验，生物活性和安全性得到验证，可以大大加快研发和优化的速度，相信会成为您开展药物筛选的理想工具。

◎ 化合物库规格及组成

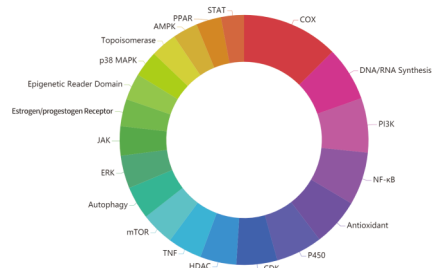
PACK SIZE

1 mg

30 μ L * 10 mM (in DMSO)

100 μ L * 10 mM (in DMSO)

250 μ L * 10 mM (in DMSO)



PPI 抑制剂库 —— 260 个小分子

L9400

蛋白-蛋白相互作用 (PPI) 在生物过程中扮有非常重要的角色，是生物信息调控的主要实现方式，并且与人类疾病息息相关。在传统药物的作用中，药物靶标通常为酶或受体，而蛋白-蛋白相互作用为我们展示了一类新的、重要的疾病治疗切入点。目前，作用于蛋白-蛋白相互作用小分子抑制剂的研究已经取得了一些进展，其中有的化合物已被应用于临床研究。同时随着越来越多的蛋白-蛋白复合物晶体结构的解析，将为新型小分子抑制剂的发现奠定基础。

TargetMol PPI 抑制剂库收集了 260 种已知活性的 PPI 相关的抑制剂，可以用于蛋白-蛋白相互作用相关的研究。

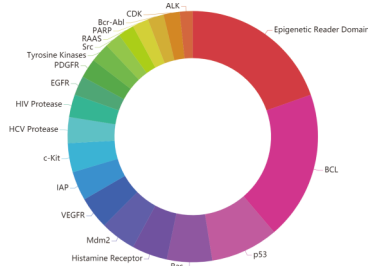
◎ 化合物库规格及组成

PACK SIZE

1 mg

100 μ L * 10 mM (in DMSO)

250 μ L * 10 mM (in DMSO)



共价抑制剂库 —— 943 个小分子

L9410

共价抑制剂，也称不可逆抑制剂，是一类有机小分子，能与特定的靶蛋白相互作用并形成共价键，导致蛋白质构象的改变，从而抑制蛋白质的活性。除了部分例外，通过共价抑制剂进行的蛋白质修饰通常是不可逆的。

与非共价抑制剂相比，虽然共价抑制剂在生物活性方面具有较大的优势，但如果这类抑制剂脱靶，也将带来更大的毒副作用。由于共价抑制剂的这种两面性，长期以来药物研发人员对其敬而远之。相当一部分共价抑制剂也是被偶然发现的，甚至人们在一些共价抑制剂上市很多年以后才研究清楚它们的作用机制，但这仍然不能否定共价抑制剂在药物发展史上举足轻重的地位，例如非甾体抗炎药阿司匹林、 β -内酰胺类抗生素青霉素、抗癌药物氟尿嘧啶、第三代不可逆 EGFR 酪氨酸激酶抑制剂 AZD9291 / Osimertinib (奥斯替尼) 等都是比较有名的共价抑制剂。

而近年来，由于可逆抑制剂所面临的难以解决的耐药性等问题，人们又重新重视对共价抑制剂的研发，并愈发认识到，以共价作用与酶结合的化合物，相较于非共价化合物，由于其特殊的药代动力学性质，使得共价化合物的有效浓度大幅度降低、有效作用时间大幅度增加。此外，越来越多的研究发现，人类目前发现的许多重大疾病如恶性肿瘤等，都受着激酶的调节，而这些酶也成为了最引人注目的药物靶点，最近几年大量上市的激酶共价抑制剂给癌症化疗领域带来了新的曙光。因此，通过合理的筛选设计和结构修饰发现共价抑制剂药物也逐渐成为一个药物研发的焦点。

不可逆共价抑制剂分子分为导引头与弹头 (warhead) 两个部分。进入体内后，导引头与目标靶蛋白结合位点先形成非共价相互作用，随后弹头与目标亲核氨基酸残基发生不可逆共价结合。常见的弹头包括迈克尔受体类、磺酰氟类、二硫键类等。

可逆共价抑制剂的结构与作用机制与不可逆共价抑制剂均相似，而不同的是其与目标靶蛋白的共价结合是可逆的。可逆共价抑制剂的亲电弹头多为氟基、酮羰基等可逆亲核加成反应受体。而其与靶标共价结合的可逆性，使得可逆共价抑制剂的药代动力学特征介于不可逆共价抑制剂和非共价抑制剂之间。可逆共价抑制剂在一定程度上继承了不可逆共价抑制剂作用时间长、有效浓度低等优点，同时也减少了脱靶带来的毒性风险。

为了满足共价抑制剂研究客户的需求，TargetMol 收集了 943 种小分子，有些是已发现的共价抑制剂分子，有些则包含共价反应基团的常见弹头，如氯乙酰基，2-氯丙酰基，丙烯酰基，1-丙-2-炔基，末端丁-2-炔，酮羰基，二硫键等，希望能够为做共价抑制剂筛选和开发的客户助一臂之力，如您对此库感兴趣，欢迎随时与我们联系~

◎ 化合物库规格及组成

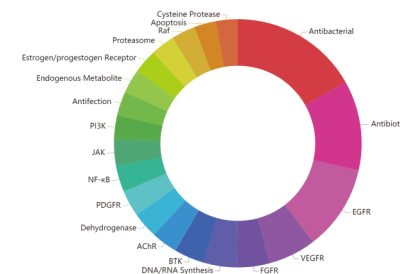
PACK SIZE

1 mg

30 μ L * 10 mM (in DMSO)

100 μ L * 10 mM (in DMSO)

250 μ L * 10 mM (in DMSO)



表型筛选靶点鉴定库 —— 1,832 个小分子

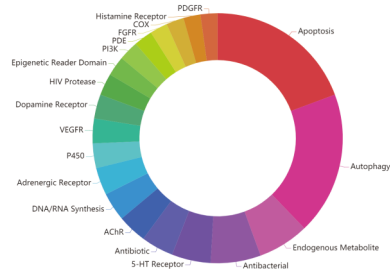
L9500

TargetMol 表型筛选靶点鉴定库是专为表型筛选的科研工作者提供的, 众所周知, 表型筛选中的体外筛选, 通常以细胞作为筛选工具, 优点是对于靶点还不明晰, 或靶点与疾病之间的关系还不明确时的药物开发, 具有非常好的效果, 常用于 First - in - class 药物的研发。而活性化合物的发现与靶标的鉴定两者间实现无缝对接, 是学术界和产业界关注的焦点和难点。

选用靶点明确的已知活性化合物进行表型筛选, 可以缩小后期靶点确认的范围, 是一种较好的基于表型进行靶点鉴定的方式。该库针对表型筛选后难以确定靶点作用机制的痛点, 精选了对 600 多个药物靶点有明确活性的 1,832 个小分子组成了该化合物库。每个靶点采取 2 - 4 个结构差异较大的化合物, 以正交矩阵原理提高靶点鉴定的成功率, 把表型筛选和靶点作用机制判断融为一体, 是表型筛选的有力工具。

● 化合物库规格及组成

PACK SIZE
1 mg
30 μL * 10 mM (in DMSO)
100 μL * 10 mM (in DMSO)
250 μL * 10 mM (in DMSO)



高通量筛选天然产物库

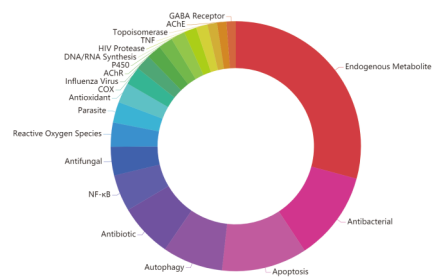
天然产物库 —— 3,650 个小分子

L6010

天然产物具有的化学结构和生物活性多样性的优势, 使其在新药研发中具有不可替代的重要地位。近年来提取分离和结构鉴定技术的快速发展, 大大提高了从天然产物中开发新药的效率和成功率。据统计, 1981 年至 2019 年所有上市的药物中, 有近 2/3 的药物在不同程度上都与天然产物相关。我国近 50 年自研成功的新药 90% 以上与天然产物有关。TargetMol 高性价比天然产物库收集 3,650 种天然产物单体, 广泛涉及 1,800 种植物来源, 成药潜力高, 帮助您提高发现药物的效率, 缩短发现时间, 降低发现成本, 获得效果理想的先导化合物。

● 化合物库规格及组成

PACK SIZE
1 mg
30 μL * 10 mM (in DMSO)
100 μL * 10 mM (in DMSO)
250 μL * 10 mM (in DMSO)



高通量筛选天然产物库 —— 4,160 个小分子

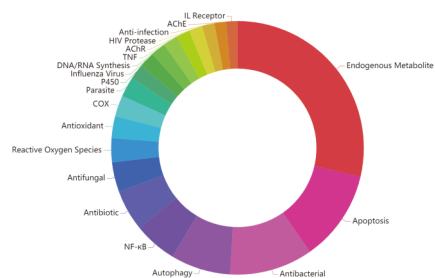
L6000

天然产物是由自然界中的生物体产生的化合物, 他们的结构和功能在大自然漫长的进化过程中得以被选择和优化, 并通过氧化态升降、骨架重排、阳离子环化、缩合反应以及周环反应等不同过程, 产生了具有高度多样性的结构。这些独特的化学结构赋予了天然产物与靶点专一性结合的能力和具有良好的生物活性, 成为发现治疗重大疾病药物的重要源泉。

TargetMol 高通量筛选天然产物库精心挑选收录了 4,160 种天然产物单体, 这些天然产物单体来源丰富, 结构多样, 具有很强的代表性。它们存在于三千余种中草药植物、动物以及微生物中提取纯化的天然来源中, 涵盖了五百余种不同骨架结构和千余种靶点受体, 大部分成分都达到对照品纯度。不仅如此, 库中还包含了众多单价极高的稀有天然产物, 性价比极高, 是您在药物开发、药理研究、干细胞分化、指纹图谱研究、质量研究等领域的有力工具。

● 化合物库规格及组成

PACK SIZE
1 mg
30 μL * 10 mM (in DMSO)
100 μL * 10 mM (in DMSO)
250 μL * 10 mM (in DMSO)

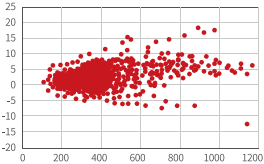


● 类药性参数分析

% of compounds compliant with Lipinski's Rules

PhysChem Properties	% Compounds
<5 HBond donors	73
<10 HBond acceptors	80
cLogP<5	91
MW<500	79

cLogP vs MW



天然产物库

虚拟筛选天然产物库



天然产物单体化合物库 —— 19,377 个小分子

L6020

天然产物是自然界给我们的珍贵宝藏，多数天然产物具有独特的化学结构，往往难以人工合成，而在生物体内通过酶的作用更易获得。此外，天然产物是生物在数百万年的进化过程中出现的，大多具有一定生物学活性，因而有更高概率从中寻找到有预期生物学活性的先导化合物。1981 年至 2014 年批准上市的小分子药物中有 50% 以上的药物直接或间接来源于天然产物。可见天然产物目前仍是新药发现的重要源泉，在药物研发中占有不可替代的地位。因发现强效抗疟天然产物青蒿素，屠呦呦女士获得 2015 年诺贝尔生理学或医学奖，也使更多的科学家投入到天然产物相关的药物研发中。

目前从天然产物库中筛选高活性、有成药潜力的先导化合物，经结构优化和改造后，获得药理学性质好的新药，是新药研发的重要途径。许多天然产物数据库能够提供数千至上万种天然产物单体的结构，但多数仅为虚拟数据，当科学家通过虚拟筛选发现有潜力的分子结构后，往往难以快速得到对应的实体天然产物。TargetMol 针对这一问题，精选 19,377 种天然产物，可以免费为科学家提供天然产物结构的 SDF 数据库，均有对应的实体化合物，确保您筛到就能买到，快速推进实验进程，尽早获得预期的实验结果。TargetMol 的天然产物库是虚拟筛选、新药研发、药理研究等领域的有力工具。

★ 您可发送邮件至 sales@tsbiochem.com，或联系我司销售人员获得此库所含化合物数据（SDF 格式）。

天然产物衍生物虚筛数据库 —— 135,000 个小分子

L6030

天然产物自古以来就被用于疾病治疗，并已成为现代药物发现和开发的灵感来源。在过去的几十年中，FDA 批准的上市药物中约有 40% 是天然产物、衍生物或与天然产物有关的合成模拟物。在天然产物中鉴定出的分子骨架具有显著的结构多样性和类药性，以此为基础可以设计出结构新颖的天然产物衍生物。

随着高通量筛选和虚拟筛选技术的发展，可以在短时间内对大量化合物进行活性相关分析，而天然产物由于提取合成问题，难以获得如类药化合物一般数量的产品用于筛选研究，这也限制了天然产物相关的药物研发工作。

通过组合化学的方式，以天然产物为模板可以合成大量天然产物衍生物及类似物。天然产物衍生物可以在保留天然产物母体结构的前提下对中间体结构进行修饰，通过引入不同的取代基，可以避免因母体结构改变造成的活性丧失。基于这些优势，天然产物衍生物更适合用于高通量筛选和虚拟筛选。

鉴于科研客户对天然产物衍生物研究的巨大兴趣，TargetMol 精心整理了 13 万余种天然产物衍生物的结构数据，免费为客户提供。该数据包含了全球多家天然产物类似物供应商结构信息，经过结构排重处理，避免重复的结构筛选工作；所包含的化合物结构均可提供对应的实体化合物，便于后续活性研究实验。当然，我们也可根据您的需求定制专属的天然产物衍生物库。

★ 您可发送邮件至 sales@tsbiochem.com，或联系我司销售人员获得此库所含化合物数据（SDF 格式）。

天然产物衍生物库



天然产物衍生物库 —— 4,000 个小分子

NY1000

天然产物一直是新药研发的宝藏，新结构和新思路的源泉。从 20 世纪 40 年代至今，新发现的小分子抗癌药物中有近 75% 与天然产物相关，1998 - 2004 年间有 21 种天然产物衍生物在西方国家上市，在随后的 5 年间，还有 19 个天然产物衍生物获得批准。很多天然产物及其衍生物都是研究和调节蛋白功能的特效工具。

目前在天然产物研究中有两大机会点：一是分离纯化出足够多的天然产物单体作为研究样本；二是一旦研究出感兴趣的单体以后如何进行结构优化，做出成药性更好的系列衍生物。

针对第一点，TargetMol 可以提供 2,800 种适合高通量筛选和 19,377 种适合计算机虚拟筛选的天然产物单体库。这些产品都有实体库存，可以快速应用到实验中。

针对第二点，我们对一些热门天然产物骨架尤其是有抗肿瘤，抗病毒潜力的天然产物骨架进行了结构优化，得到一系列成药潜力好的化合物，方便客户用更快的时间和更低的成本对相关疾病领域的天然产物研究进行更深入的探索。

天然产物骨架衍生物库以天然产物骨架为基础，通过化学修饰或降解的方法，逐步获得天然产物衍生物。我们以 22 种极具研究价值的天然产物骨架为基础构建了含有 4,000 个化合物的天然产物衍生物库，是抗肿瘤、抗病毒等研究领域的有力工具，是平台建设多样性的重要部分。

★ 您可发送邮件至 sales@tsbiochem.com，或联系我司销售人员获得此库所含化合物数据（SDF 格式）。

天然产物库

特色天然产物库



人内源代谢化合物库 —— 1,400 个小分子

L2500

研究表明生物体受刺激或扰动后（如低氧、营养物质、药物等）代谢产物会发生变化，基于肿瘤细胞内、外相关特征性小分子代谢标记物的异常变化来诊断恶性肿瘤、进行药物筛选、评价药物毒性等的方法也逐渐成为研究热点。癌细胞具有一种独特的、有别于正常细胞的代谢表型，监测癌细胞代谢过程中小分子代谢物的波动情况，将有利于预测肿瘤的进展、了解体内物质代谢途径、探索癌症发病机制及药物作用机制等。目前的研究

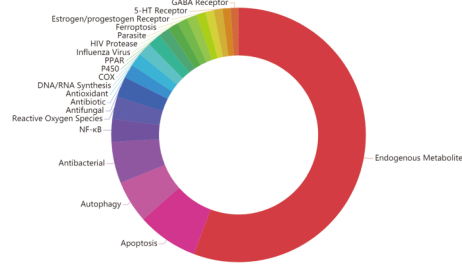
主要集中于与癌细胞能量代谢相关的化合物研究,如核苷类、氨基酸类、脂类、糖类。例如,已发现多种与肿瘤相关的脂类标记物,胆碱、磷酸胆碱、磷酸卵磷脂、胆固醇等脂类变化谱是细胞膜破坏的标志;丙酮酸、乳酸、异丁酸等是与肿瘤细胞糖代谢相关的生物标记物,探索通过靶向脂代谢、糖代谢途径治疗恶性肿瘤的策略正备受关注。

TargetMol 人内源代谢化合物库由 1,400 种与内源代谢相关的生物活性化合物组成,可用于研究内源性代谢疾病和新药筛选。

◎ 化合物库规格及组成

PACK SIZE

1 mg
30 μ L * 10 mM (in DMSO)
100 μ L * 10 mM (in DMSO)
250 μ L * 10 mM (in DMSO)



植物来源化合物库 —— 2,720 个小分子

L4600

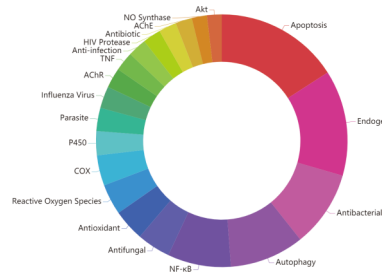
自然界创造了几乎无穷无尽的分子实体,为药物研发特别是新型药效团的发现创造了无限资源。在全球范围内,天然产物自古以来一直都是传统治疗的支柱。植物作为药物治疗疾病具有悠久的历史,植物来源的化合物具有更好的耐受性和可接受性。迄今为止,已对 35,000-70,000 种植物进行了药用筛选。第一种商用的纯植物产物是默克公司于 1826 年销售的吗啡,第一种半合成纯药物阿司匹林,是基于从白柳中分离出的天然产品水杨苷,由拜耳于 1899 年推出。此后陆续分离出了多种早期药物,如可卡因、可待因、洋地黄毒苷、奎宁和毛果芸香碱等,其中一些仍在使用中,以及其他一些近期出现的植物衍生化合物,这些化合物经过开发并已作为药物销售,其中包括:来自短叶红豆杉的紫杉醇,用于肺部、卵巢癌和乳腺癌;青蒿素来自中国植物青蒿,用于对抗多药耐药性疟疾;水飞蓟素从水飞蓟种子中提取,用于治疗肝脏疾病。

TargetMol 植物来源化合物库精选 2,720 个植物来源天然产物的独特集合,具有良好的成药潜力,可用于天然产物来源的化合物筛选和新药研发。

◎ 化合物库规格及组成

PACK SIZE

1 mg
30 μ L * 10 mM (in DMSO)
100 μ L * 10 mM (in DMSO)
250 μ L * 10 mM (in DMSO)



天然多酚类化合物库 —— 411 个小分子

L6100

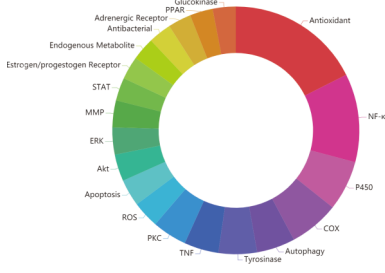
天然多酚类化合物具有抗氧化、抗癌、抗诱变和抗炎等多种生物活性,能够阻滞细胞周期,诱导细胞凋亡,抑制细胞粘附、迁移、增殖和分化,在癌症预防和治疗中发挥重要作用。来自药草和膳食植物的酚类化合物包括酚酸、类黄酮、单宁、芪类、类姜黄素、香豆素、木脂素、醌等,其特征存在于大量的苯酚结构单元,这些酚结构的存在决定了每一个化合物独特的物理、化学和生物特性。

天然多酚类化合物库是 411 个天然多酚化合物的独特集合,是筛选抗癌药物的理想工具,可用于高通量和高内涵筛选。

◎ 化合物库规格及组成

PACK SIZE

1 mg
100 μ L * 10 mM (in DMSO)
250 μ L * 10 mM (in DMSO)



药食同源库 —— 910 个小分子

L6300

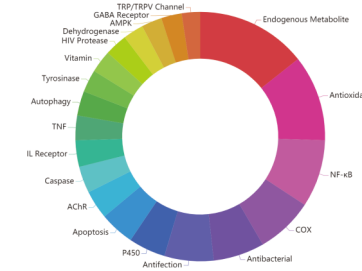
“药食同源”指许多食物即药物,中国古代医学家将中药的“四性”、“五味”理论运用到食物之中,认为每种食物也具有“四性”、“五味”,古希腊医学家希波克拉底提出“food is medicine”,现代医学认为饮食中包含的食物在控制炎症水平、平衡血糖、调节血压和血脂、帮助消化器官处理和消除代谢废物等方面起着关键作用。卫计委 2012 年公布了 86 种既是食品又是药品的中药名单,2014 年又新增 15 种药食同源的中药材物质。

我们根据卫计委公布的药食同源原料以及相关的文献资料,精心筛选 910 个药食同源的化合物,因其食物来源的特性,这些化合物安全性得到保证,具有很高的成药潜力,可用于高通量筛选和高内涵筛选。

◎ 化合物库规格及组成

PACK SIZE

1 mg
30 μ L * 10 mM (in DMSO)
100 μ L * 10 mM (in DMSO)
250 μ L * 10 mM (in DMSO)



中国药典收录天然产物库 —— 2,070 个小分子

L6800

中药的有效性已经在数千年的实践中得到了验证,为挽救人类的生命做出了重大贡献,但由于其成分过于复杂,难以通过实验证明其作用机理,使中药在现代医学中的应用受到了极大限制。实际上中药具有一定的药理作用主要是因为其中含有的活性化合物,如黄花蒿具有抗疟药效是因为其中含有抗疟活性成分青蒿素,人参被称之为“百草之王”,具有多种药理活性,也是因为其中含有多人参皂苷成分。随着国家对中药现代化的重视日益加深,中药单体的研究已经成为研究中药抗病机理的主要途径。

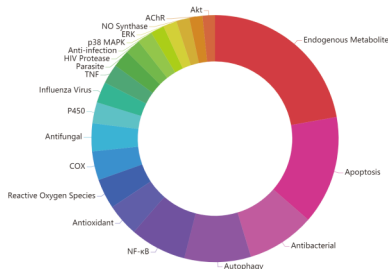
与人工合成的化合物相比,中药单体往往具有更高的生物学活性和结构多样性,更易进入细胞发挥药效,拥有更高的生物学活性。此外,针对一些特殊的困难靶点,从中药单体中筛选得到其调节剂的概率更大。因此,从天然产物库中筛选得到活性先导化合物并经结构优化,获得有成药潜力的候选化合物是目前新药研发的重要途径。

TargetMol 精选了 2,070 种中国药典中收录的天然产物,包括了丹参,杜仲,黄芪等 246 种传统中药的主要活性成分,是抗癌、抗菌、细胞凋亡、细胞自噬研究领域的有力工具。这些中药单体含有黄酮、皂甙等各类结构,多样性好,具有较明确的活性信息,方便您根据实验结果对相关信息加以利用,提高筛选到活性化合物的概率。

◎ 化合物库规格及组成

PACK SIZE

1 mg
30 μ L * 10 mM (in DMSO)
100 μ L * 10 mM (in DMSO)
250 μ L * 10 mM (in DMSO)



抗癌天然产物库 —— 1,471 个小分子

L6700

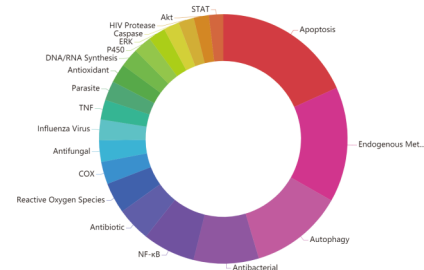
癌症是严重危害人类健康的疾病,从天然产物中寻找预防和治疗恶性肿瘤的活性成分始终是国内外肿瘤药物开发的热门领域,众多药物化学家们一直在致力于天然抗癌药物的开发。随着对肿瘤发生、恶变的分子机制研究不断深入,人们以肿瘤发生发展过程中相关酶、受体为作用靶点,筛选出一系列新的有潜在抗癌活性的天然先导化合物。据权威机构统计,从 1981 年至今,99 种小分子抗癌药物中的 79 种是以天然产物为基础研制成功的,例如紫杉烷类、喜树碱类和长春碱类等热门抗肿瘤药物。天然产物是一个巨大的药物开发宝库,天然产物的研究与开发历来是人类寻找新药以及向疾病作斗争的重要手段。借助天然产物的结构先导、修饰和改造也促进了合成药物的迅速发展。

TargetMol 精心筛选 1,471 种来源于植物、动物或微生物的具有已知或潜在抗肿瘤活性天然产物,性价比高,能够为您提供肿瘤药物开发、天然先导化合物筛选等研究的有力工具。

◎ 化合物库规格及组成

PACK SIZE

1 mg
30 μ L * 10 mM (in DMSO)
100 μ L * 10 mM (in DMSO)
250 μ L * 10 mM (in DMSO)



中药抗炎分子库 —— 1,040 个小分子

L6710

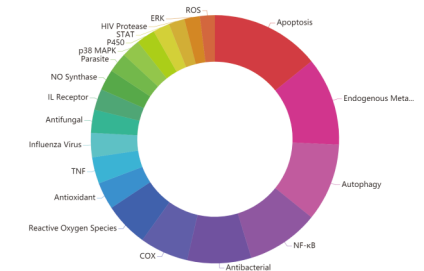
炎症是临床常见的一个病理过程,可以生于机体各部位的组织和各器官,抗炎药物在临床上已经是仅次于感染药物的第二大类药物。临床上广泛使用的抗炎药物是非甾体类抗炎药物和肾上腺皮质激素类药物,但是两者均被报道有诸多的不良反应。中药因其资源丰富,副作用少等特点开始进入人们的视线。大量报道证实,很多中药都具有不同程度的对抗各种炎症的作用。随着研究的深入,已报道出单味中药、中药复方制剂、中草药有效部位和有效成分等均有抗炎作用,以中药为基源的抗炎成分、机理研究与创新药物的开发成为世界范围内学者们研究的热点。

TargetMol 精选了 1,040 种与炎症相关的中药单体,来源包含金银花、黄连、黄芩、三七等多种中药,这些中药单体包含黄酮、皂苷、萜类、生物碱等结构,多样性好,具有较明确的活性信息,为中药抗炎相关研究提供了有力工具。

◎ 化合物库规格及组成

PACK SIZE

1 mg
100 μ L * 10 mM (in DMSO)
250 μ L * 10 mM (in DMSO)



稀有天然产物库 —— 284 个小分子

L6900

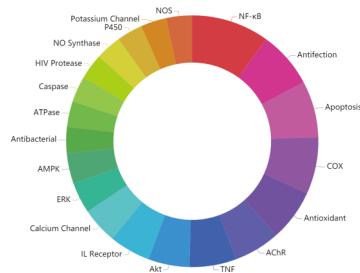
天然产物的化学多样性无与伦比，是生物活性小分子筛选的理想选择。从历史上看，天然产物一直是新药研发重要的来源，据权威机构统计，从 1981 年至今，99 种小分子抗癌药物中的 79 种是以天然产物为基础研制成功的。天然产物已被证明可以成功的调控某些孤立的但又很重要的靶点，如一系列抗菌靶点，特别是蛋白质与蛋白质相互作用。因此，许多研究人员认为天然产物及其衍生物是研究和操纵蛋白质功能的独特工具。

由于天然产物在新药研发事业中不可忽视的作用和无法替代的地位，很多科研人员都尝试从天然产物中寻找新的成药化合物。TargetMol 稀有天然产物库收集了 284 种稀有的天然产物，具有较高的研究价值，可以用于药物开发、药理研究、干细胞分化等研究方向。

◎ 化合物库规格及组成

PACK SIZE

100 μ L * 10 mM (in DMSO)
250 μ L * 10 mM (in DMSO)



天然产物共价库 —— 596 个小分子

L6150

天然产物已被证明可以成功的调控某些孤立的但又很重要的靶点，如一系列抗菌靶点，特别是蛋白质与蛋白质相互作用。因此，许多研究人员认为天然产物及其衍生物是研究和操纵蛋白质功能的独特工具。

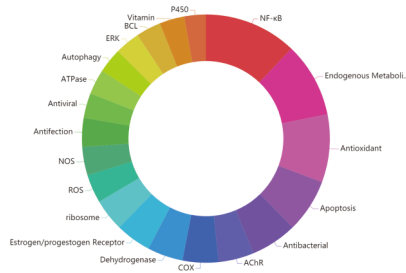
共价化合物，是一类有机小分子，能与特定的靶蛋白相互作用并形成共价键，导致蛋白质构象的改变，从而抑制蛋白质的活性。除了部分例外，通过共价作用进行的蛋白质修饰通常是不可逆的。

TargetMol 天然产物共价库精心筛选 596 种天然产物共价化合物，不仅具有天然产物的特点，还具有共价化合物的作用机制，性价比高，是药物开发、药理研究、干细胞分化、指纹图谱研究、质量研究等领域的有力工具。

◎ 化合物库规格及组成

PACK SIZE

1 mg
30 μ L * 10 mM (in DMSO)
100 μ L * 10 mM (in DMSO)
250 μ L * 10 mM (in DMSO)



中药单体化合物库 —— 2,560 个小分子

L6810

中药的有效性已经在数千年的实践中得到了验证，为挽救人类的生命做出了重大贡献，但由于其成分过于复杂，难以通过实验证明其作用机理，使中药在现代医学中的应用受到了极大限制。实际上中药具有一定的药理作用主要是因为其中含有的活性化合物，如黄花蒿具有抗癌药效是因为其中含有抗癌活性成分青蒿素，人参被称之为“百草之王”，具有多种药理活性，也是因为其中含有多人参皂苷成分。随着国家对中药现代化的重视日益加深，中药单体的研究已经成为研究中药抗病机理的主要途径。

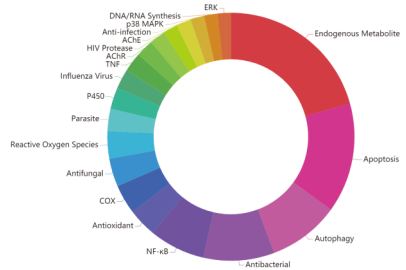
与人工合成的化合物相比，中药单体往往具有更高的生物学活性和结构多样性，更易进入细胞发挥药效，拥有更高的生物学活性。此外，针对一些特殊的困难靶点，从中药单体中筛选得到其调节剂的概率更大。

TargetMol 精选 2,560 种中药来源的单体化合物，来源包括三七、甘草、当归、陈皮、黄连、人参等近 800 种传统中药，含有黄酮、生物碱、萜类、糖苷等多种结构类型，是抗癌、抗炎、抗菌、细胞凋亡、细胞自噬研究领域的有力工具。

◎ 化合物库规格及组成

PACK SIZE

1 mg
30 μ L * 10 mM (in DMSO)
100 μ L * 10 mM (in DMSO)
250 μ L * 10 mM (in DMSO)



天然产物库

高通量/高内涵化合物库

BMS 代表性核心库 —— 300,000 个小分子

DD3700

陶术生物基于 Bemis-Murcko scaffolds (BMS) 概念，从 160 万小分子进行挑选约 22.5 万小分子，基于结构差异性分析 (Hierarchical clustering、Min-Max algorithm、Dice Similarity / ECFP2048) 挑选约 7.5 万种多样性分子，组建成具有高度多样性的化合物库，共计约 30 万小分子，提供更好的结构多样性，是高通量筛选平台的必备工具。

★ 您可发送邮件至 sales@tsbiochem.com，或联系我司销售人员获得此库所含化合物数据 (SDF 格式)。

Pre 多样性库 —— 100,000 个小分子

D3100

高通量药物筛选库适用于高通量/高内涵药物筛选平台的新药研发,以 100,000 的样本量对多种靶点和疾病同时进行药物筛选,是各高校研究所和药厂筛选中心的优质选择。该库基于骨架多样性和靶点多样性两个角度,从 160 万个小分子中选取合适的目标分子构建。

结构骨架方面:众所周知,具有相同骨架结构的不同化合物在生物学活性上的表现上既可能相似,也可能有很大的不同,但肯定的是,化合物库包含的骨架越多,其代表的结构多样性也就越高,筛选的覆盖范围就越大,作为科研的结果,筛选的成功率也就越高。因此足够多的化合物骨架是化合物结构多样性高的保证。本高通量筛选库包含了 4,000 多种骨架结构,还有一万多种结构独特的化合物,多样性系数高达 0.83,具有非常好的结构多样性,覆盖更多药效结构空间。

药物靶点方面:化合物库尽可能多的覆盖热点药物靶点是作为药物筛选平台成功的关键,我们通过计算机虚拟筛选、结构生物学、体外、细胞和表型预测等多种工具,对 Chemdiv 多达 160 万个化合物进行筛选,精选到 100,000 个类药性的小分子,这些小分子在抗肿瘤、GPCR、蛋白相互作用、神经系统疾病以及抗病毒等多种靶点具有成药潜力。该库不仅可以满足平台支撑的各个课题组都能获得所需的研究工具,实现一库多用;即使在基于表型的筛选中,增加靶点的覆盖度也可以提高筛选的成功概率,帮助您早日筛选到需要的 HIT。

★ 您可发送邮件至 sales@tsbiochem.com,或联系我司销售人员获得此库所含化合物数据(SDF 格式)。

药物靶点库 —— 54,000 个小分子

DO1200

基于靶点的高通量筛选是新药筛选的重要策略,因此使用单一靶点库进行筛选是比较常见的做法。但使用单一靶点库也存在许多问题:1、化合物数量相对较少;2、不适用于信号通路多靶点研究;3、过于强调药物纵向深度弱化了横向药物发现的可能性;4、仅适用于单一筛选目的,利用率较低,增加了研发成本。而在基于表型的筛选中,增加靶点的覆盖范围可以大大提高筛选成功率。

陶术药物靶点库基于“靶点多样性”概念和现有数据设计,通过计算机虚拟筛选、结构生物学、体外、细胞和表型预测等多种工具,对 Chemdiv 多达 160 万个化合物进行筛选,得到 5 万个类药性的小分子,涵盖 300 多个药物靶点,5 大模块(非人源靶点模块、天然产物来源骨架模块、单靶点模块、识别元件模块、特色模块)。无论是研究细胞进程相关的“困难”靶点,还是研究信号通路和广泛地生物学靶点,亦或是蛋白相互作用和整体治疗领域研究,均可使用药物靶点库筛选,实现一库多用,增加化合物库的经济实用性。

优良的理化性质是化合物具有成药潜力的关键因素,性质优良的化合物可以大大节省后续结构优化和 ADME 评估的时间,缩短研究周期。药物靶点库中的所有化合物均经过严格的筛选,具有优良的成药潜力:1、分子量在 200 - 500 间,便于后续修饰;2、可旋转键数量适中(2 - 9 个),药物口服生物利用度良好;3、cLogP 小于 6,溶解性良好;4、PSA(分子极性表面积)在 50 - 150 之间、药物转运特性较好;5、环数和芳香环数均符合大部分药物结构的特征。这些小分子在分子量、亲疏水常数等方面都符合药物的类似性。同时,由于这些化合物可规模化供应,药物靶点库的性价比较高,适合于在大型筛选库建立初期的基础化合物库购置,为后期在多靶点、多通路上的类药筛选和前沿研究奠定化合物基础。

★ 您可发送邮件至 sales@tsbiochem.com,或联系我司销售人员获得此库所含化合物数据(SDF 格式)。

Mini 骨架库 —— 5,033 个小分子

L5600

从一百多万个化合物中精心挑选,每个骨架仅挑选 1 个化合物,共 5,033 种化合物。为单个课题组量身设计,降低筛选门槛和筛选成本。

★ 您可发送邮件至 sales@tsbiochem.com,或联系我司销售人员获得此库所含化合物数据(SDF 格式)。

Golden 骨架库 —— 10,000 个小分子

L5610

从 160 万个类药性化合物中百里挑一,每个骨架挑选 1-3 个化合物,增大筛选成功几率,组成 10,000 种化合物,在骨架结构基础上丰富官能团结构,增加化学空间结构覆盖覆盖率,为小规模 HTS 精心打造,兼具效率与效能的匹配。

★ 您可发送邮件至 sales@tsbiochem.com,或联系我司销售人员获得此库所含化合物数据(SDF 格式)。

多样性核心库 —— 50,000 个小分子

DF4500

理论上可合成的化合物数量大约为 10^{63} 个,而目前市售的化合物与之相比不过沧海一粟。如何从庞大的化学空间中寻找具有成药潜力的化合物是药物筛选领域的一大难题。组合化学策略能够快速构建包含数十万种小分子的化合物库。这种方式获得的小分子结构较为相似,在生物活性上具有一定相关性,适合于有特定化学空间目标的筛选方式。结构多样性策略则是合成多种结构差异较大的小分子。这些小分子在化学空间中的分布更为均匀,能够更好地对化学空间进行采样。通过对这些小分子的筛选,可以锁定合适的化学空间范围,发现更有潜力的成药结构。

陶术生物根据客户对结构多样性的需求,推出多样性核心库。整个多样性核心库均在保持化合物数量规模的同时,尽可能地对化学空间进行有效采样,实现化合物库规模和多样性的完美平衡。多样性核心库精心挑选各筛选化合物品牌最具结构代表性的化合物,组合成核心库的各个 Part。每个 Part 覆盖的化学空间可相互补充,组合成更大规模的多样性核心库。

多样性核心库从 Chemdiv 品牌 160 万个库存化合物中精心挑选 5 万种化合物,覆盖 160 万种化合物的结构空间。该化合物库在剔除 PAINS、经过 REOS 和 MedChem 过滤器后,专注化合物结构的多样性,以大小适合的化合物库规模涵盖广泛的结构多样性。如果您更关注化合物结构的多样性,多样性核心库是一个很好的选项。

陶术生物的多样性核心库可提供 96 孔板的液体包装,也可以根据客户的需要定制包装,高度匹配客户需求。

★ 您可发送邮件至 sales@tsbiochem.com,或联系我司销售人员获得此库所含化合物数据(SDF 格式)。

多样性核心预制库 —— 50,000 个小分子

LF1000

从 Lifechemicals 品牌的化合物中精心挑选 50,000 种具有最佳理化特性的筛选化合物,这些化合物基于新合成的化合物集合,使用结构差异性方法筛选而出。该库能够以较小的化合物数量实现结构多样性的筛选目的。

★ 您可发送邮件至 sales@tsbiochem.com,或联系我司销售人员获得此库所含化合物数据(SDF 格式)。

更多高通量/高内涵化合物库

编号	产品名称	化合物数量	编号	产品名称	化合物数量
AN1000	BioDesign 专用库	170269 个	LF1000	多样性核心预制库	50240 个
AN1100	精选先导化合物类似物库	91001 个	LF2800	DNA 编码化合物库	70000 个
AN1200	结构多样性类药化合物库	261120 个	LF7100	富含 Fsp ³ 的筛选库	51000 个
AN2100	多样性预制库	74088 个	LF7200	3D 化合物库 (用于 HTS)	34500 个
CB1000	多样性核心库	100000 个	LF7500	骨架化合物库	140000 个
CB1100	EXP 多样性库	50000 个	MB1000	预制多样性库	14400 个
DD3700	代表性核心库	300000 个	MB1100	多样性库	14000 个
DD5400	3D 药效团多样性库	50000 个	OA1500	多样性库	10000 个
DO1000	sp3 结构多样性库	100000 个	OA1800	类先导化合物库	95000 个
DO1700	溶解多样性库	9500 个	SC1000	多样性库	10000 个
DP1400	靶点多样性库	45000 个	US3000	类先导库	30000 个
DP1800	PRMT 靶向库	31000 个	US3200	形状多样性库	837 个
DP2180	2018 药化趋势库	50000 个	US3600	Fsp3 多样性库	16504 个
EN1000	药物发现多样性库 1	10240 个	US4300	特有化合物库	30000 个
EN1100	药物发现多样性库 2	50240 个	VM1500	精选多样性库	3400 个
EN1200	Hit 定位器库	234240 个			

编号	产品名称	化合物数量	编号	产品名称	化合物数量
DP2280	抗衰老库	50000 个	LF2900	表观遗传筛选库	11500 个
DP2350	抗菌库	15000 个	OA1700	CNS 库	2000 个
DS2500	CNS 靶向库	44000 个	OA2500	机器学习 SARS 靶向库	1577 个
DS5000	眼部疾病小分子库	13000 个	OA3600	阿尔兹海默症多元药理学库	631 个
EN1800	抗菌库	28831 个	OT2500	抗癌库	822 个
EN2800	免疫-肿瘤库	52927 个	OT2600	抗惊厥药物库	1830 个
LF1200	抗肝炎筛选库	1604 个	OT2700	抗抑郁药物库	1554 个
LF1300	抗 HIV 筛选库	16800 个	OT2800	抗真菌库	828 个
LF1400	抗炎筛选库	2900 个	OT3000	抗偏头痛库	426 个
LF1500	抗菌筛选化合物库	11100 个	OT3100	抗肥胖库	1714 个
LF1600	抗癌筛选化合物库	6300 个	OT3200	抗精神病药物库	1315 个
LF1700	抗疟疾筛选库	7900 个	OT3300	抗结核药物库	1828 个
LF1800	抗原动物筛选库	8200 个	US1800	抗菌库	6104 个
LF1900	抗结核筛选库	7600 个	US1900	抗病毒库	4183 个
LF2000	抗病毒库	13700 个	US2100	CNS 库	10651 个
LF2300	CNS 筛选库	9900 个	VM1300	CNS 库	60100 个

按潜在疾病分类

编号	产品名称	化合物数量	编号	产品名称	化合物数量
AN1600	CNS 多样性预制库	6055 个	DD1300	抗炎库	28000 个
AN3500	CNS 大环库	1122 个	DD1400	CNS 库	26000 个
AN3900	抗菌化合物库	5968 个	DD1500	抗 HIV1 库	21000 个
AN4000	抗病毒化合物库	6827 个	DD1700	抗真菌库	18000 个
AN4800	免疫肿瘤库	6334 个	DD1900	血管生成库	17000 个
AN5600	CNS 库	120883 个	DD2000	CNS 血脑屏障库	23000 个
AN5700	靶向肿瘤库	4815 个	DD2100	抗 HBV 病毒库	11000 个
CB1200	抗新冠病毒库	15000 个	DD2300	抗感染库	8000 个
CB1800	CNS MPO 库	50000 个	DD2400	免疫靶向库	7300 个
CB1900	CNS 大环库	3000 个	DD3100	再生医学靶向库	23000 个
DD1100	抗肿瘤筛选库	65000 个	DP2250	CNS MPO 库	30000 个
DD1200	抗寄生虫库	28000 个	DP2260	心血管疾病库	23000 个

按潜在通路靶点分类

编号	产品名称	化合物数量	编号	产品名称	化合物数量
AN1900	激酶预制库	6493 个	AN5300	金属螯合物库	1794 个
AN2300	GOSTAR 专用库	1878 个	AN5500	拟肽化合物库	9144 个
AN3400	靶向 RNA 大环库	1065 个	AN5800	蛋白酶库	6640 个
AN4100	表观遗传库	5391 个	CB1500	激酶库	12000 个
AN4200	靶向 GPCR 库	8532 个	CB1600	激酶核心库	9000 个
AN4300	脂质 GPCR 库	2344 个	CB1700	GPCR 库	8000 个
AN4400	大环多肽 GPCR 库	6285 个	CB2000	离子通道库	7500 个
AN4500	离子通道库	8559 个	CB2100	离子通道核心库	5000 个
AN4600	激酶库	6084 个	CB2200	核受体靶向库	2700 个
AN4700	II 型激酶抑制剂库	2376 个	DD1000	抗病毒筛选库	87000 个
AN4900	RNA 靶向小分子库	1862 个	DD1800	抗有丝分裂微管蛋白库	18000 个
AN5000	信号通路抑制剂库	4817 个	DD2700	神经肽 S 库	3000 个
AN5200	核受体库	5436 个	DD2900	雄激素受体拮抗剂库	4300 个

类药性化合物库

编号	产品名称	化合物数量
DD3200	GABA 靶向库	7294 个
DD3300	RPTP 靶向库	3900 个
DD3600	STING 激动剂库	6368 个
DD4100	抗 PLpro 抑制剂筛选库	6442 个
DD4200	3CLpro 抑制剂筛选库	4792 个
DD4300	ACE2 抑制剂筛选库	3051 个
DD4600	MCL1 靶向库	12000 个
DD4700	精氨酸酶靶向库	2000 个
DD4800	整合剂靶向基质金属蛋白酶文库	9300 个
DD4900	离子通道筛选库	26000 个
DD5000	HDAC 筛选库	9500 个
DD5200	非受体型蛋白酪氨酸磷酸酶靶向库	33000 个
DD5600	RNA蛋白相互作用抑制剂筛选库	2111 个
DF4300	碳酸酐酶 II 库	5000 个
DF4400	NOTUM (Wnt 通路) 库	4000 个
DO1400	趋化因子库	20000 个
DO2000	溴结构域调节剂库	5816 个
DO2100	吲哚胺 2,3-二加氧酶1靶向库	6000 个
DO5300	人蛋白酶靶向活性库	2976 个
DO5500	人受体靶向库	5609 个
DP1000	PPI计算机辅助药物设计库	230000 个
DP1200	凋亡靶向库	54000 个
DP1500	GPCR 靶向库	40000 个
DP1600	DNMT 靶向库	38000 个
DP1700	蛋白激酶抑制剂库	38000 个
DP1880	RAR 配体库	7200 个
DP1900	表观遗传筛选库	30431 个
DP2100	变构激酶抑制剂库	26000 个
DP2160	神经递质转运体抑制剂库	12000 个
DP2190	转录组靶向库	21000 个
DP2200	PPI螺旋转角 3D 模拟物库	74000 个
DP2290	RNA等位三核苷酸模拟物库	29000 个
DP2300	MDM2-p53相互作用抑制剂库	23000 个
DP2400	腺苷受体靶向库	21000 个
DP2450	PD-1/L1库	500 个
DP2500	β2肾上腺素库	20000 个
DP2580	Bcl2-PPI抑制剂库	11000 个
DP2600	GP-120 & GP-41库	20000 个
DP2800	自噬靶向库	17000 个
DP2900	PI3K 靶向库	19000 个

编号	产品名称	化合物数量
DP3100	磷酸酶抑制剂筛选库	15000 个
DP3200	Akt 靶向库	12000 个
DP3400	G9a 抑制剂库	13000 个
DP3500	Hsp90 靶向库	13000 个
DP3600	P24 靶向库	12000 个
DP3700	Sh2 库	12000 个
DP3800	KRAS 靶向库	11000 个
DP3900	钙离子通道库	11000 个
DP4000	CXCR4 靶向库	11000 个
DP4300	Aurora A-B 激酶库	10000 个
DP4400	核酸配体	9000 个
DP4500	Nfkb 调节剂库	9000 个
DP4600	SH2 PTB 靶向库	7000 个
DP4680	电压门控离子通道靶向库	5000 个
DP4700	beta-Catenin通路靶向库	8000 个
DP4800	单胺转运蛋白库	8000 个
DP4900	II 型激酶抑制剂库	8000 个
DP5000	MEF2-HDAC (II类) 调节剂库	6000 个
DP5100	糖皮质激素受体库	5000 个
DP5300	BRD4 靶向库	5000 个
DP5400	GSK3β 靶向库	5000 个
DP5500	Ha2 库	4000 个
DP5560	c-Met 靶向库	16000 个
DP5600	配体门离子通道库	4000 个
DP5700	整合素受体靶向库	2000 个
DP5800	Hh/Wnt 通路靶向库	2000 个
DP5900	脯氨酸激酶库	2000 个
DP6000	核受体靶向库	1700 个
DP7690	MDM2 靶向库	6500 个
DP8300	半胱氨酸蛋白酶抑制剂库	8000 个
DP8400	丝氨酸蛋白酶抑制剂库	37000 个
DP8700	TLR-8 配体库	900 个
DP9200	DGK 抑制剂库	12000 个
DP9300	Mac1-GPIb alpha相互作用库	27000 个
DS3000	RORγ 库	13000 个
DS4000	cPLA2 抑制剂库	5000 个
DC1000	特权片段注释库	190000 个
DQ3000	Factor Xia 化合物库	4617 个
DC1010	特权片段注释库- GPCR Family A	190000 个
DC1020	特权片段注释库-Spiro Library	20563 个

编号	产品名称	化合物数量
DC1030	特权片段注释库-Epigenetics	9196 个
DC1040	特权片段注释库-Transferases	23001 个
DC1050	特权片段注释库-Voltage-gated	17952 个
DC1060	特权片段注释库-Kinases	18350 个
DC1070	特权片段注释库-GPCR Family C	5071 个
DC1080	特权片段注释库-GPCR Taste family	2675 个
DC1090	特权片段注释库-Ligases	11828 个
DC1100	特权片段注释库-GPCR Frizzled family	3434 个
DC1110	特权片段注释库-Proteases	22863 个
DC1120	特权片段注释库-Thrombopoietin receptors	4908 个
DC1130	特权片段注释库-Phosphodiesterases	13154 个
DC1140	特权片段注释库-Ligand-gated	9028 个
DC1150	特权片段注释库-GPCR Family B	9320 个
DC1160	特权片段注释库-Toll-like and IL-1 receptors	3536 个
DC1170	特权片段注释库-Oxidoreductases	8812 个
DC1180	特权片段注释库-Lyases	19530 个
DC1190	特权片段注释库-Sigma Opioid receptors	8724 个
DC1200	特权片段注释库-Isomerases	1206 个
DC1210	特权片段注释库-Phosphatases	15354 个
DC1220	特权片段注释库-Aminoacyltransferases	3008 个
DC1230	特权片段注释库-Beta amyloid A4 protein	4617 个
EN1600	变构 GPCR 调节剂库	14400 个
EN1700	变构激酶库	4800 个
EN1900	水通道蛋白库	1348 个
EN2000	BACE 靶向库	7171 个
EN2100	钙离子通道库	10560 个
EN2200	DNA 稳定蛋白靶向库	5530 个
EN2300	表观遗传靶向库	9352 个
EN2500	GPCR 库	54080 个
EN2600	激酶 ATP 位点结合剂筛选库	24000 个
EN2700	IDO 靶向库	5502 个
EN2900	离子通道库	36800 个
EN3000	JAK/STAT 通路调节剂库	1392 个
EN3100	激酶库	65200 个
EN3200	犬尿酸通路库	12304 个
EN3300	脂 GPCR 靶向库	5440 个
EN3400	脂氧合酶靶向库	1388 个
EN3800	蛋白相互作用库	40640 个
EN3900	RNA 靶向库	15520 个
EN4000	丝氨酸水解酶库	12560 个

编号	产品名称	化合物数量
EN4100	钠离子通道库	5440 个
EN4200	微管靶向库	3452 个
LF2100	水通道蛋白筛选库	2000 个
LF2200	ATP 酶靶向库	8800 个
LF2400	细胞色素酶抑制剂库	1900 个
LF2700	DNA 与 RNA 聚合酶筛选库	18234 个
LF3000	谷氨酸受体靶向库	4600 个
LF3100	GPCR 靶向库-基于 2D 相似性	7600 个
LF3200	GPCR 靶向库-基于受体	8500 个
LF3300	预制解旋酶靶向库	2745 个
LF3400	激素相关靶向库	750 个
LF3500	NMDA 受体筛选库	1000 个
LF3600	激酶靶向库	32000 个
LF3700	激酶筛选库	3000 个
LF3800	激酶靶向库-基于分子对接	13000 个
LF3900	酪氨酸激酶筛选库	5700 个
LF4000	PDK1 靶向库	760 个
LF4100	ALK 酪氨酸激酶靶向库	2500 个
LF4200	Aurora A 激酶靶向库	590 个
LF4300	Aurora B 激酶靶向库	1000 个
LF4400	PKA 靶向库	730 个
LF4500	c-Met (HGFR) 激酶靶向库	1100 个
LF4600	CDK2 靶向库	400 个
LF4700	ERK5 (MAPK7) 靶向库	900 个
LF4800	FGFR1 酪氨酸激酶靶向库	646 个
LF4900	JAK 靶向库	600 个
LF5000	p38 MAP 激酶靶向库	1100 个
LF5100	PI3K 靶向库	939 个
LF5200	ROCK 靶向库	1360 个
LF5300	VEGFR2 靶向库	1000 个
LF5400	连接酶靶向库	3900 个
LF5500	KDM4A 靶向库	2000 个
LF5600	整合剂靶向库	5700 个
LF5700	基质金属蛋白酶靶向库	2000 个
LF5800	核受体筛选库	11000 个
LF5900	PI3K/Akt/mTOR 靶向库	4400 个
LF6100	磷酸酶筛选库	2700 个
LF6200	PDE10 靶向库	1450 个
LF6300	天冬氨酸蛋白酶筛选库	1400 个
LF6400	Caspase 靶向库	2800 个

编号	产品名称	化合物数量
LF6500	半胱氨酸蛋白酶靶向库	3700 个
LF6600	蛋白酶靶向库	5700 个
LF6700	丝氨酸蛋白酶筛选库	400 个
LF6800	RNA靶向库	4400 个
LF6900	STING靶向库	1600 个
OA1900	SARS-CoV-2非结构蛋白14(NSP14)靶向库	1490 个
OA2000	SARS-CoV-2内切核糖核酸酶(NSP15)靶向库	626 个
OA2100	SARS-CoV-2 螺旋酶 (NSP13) 靶向库	1170 个
OA2200	SARS-CoV-2 NSP16靶向库	1049 个
OA2300	SARS-CoV-2 P1pro靶向文库	1058 个
OA2400	SARS-CoV-2 RNA 依赖性RNA 聚合酶 (RdRp) 靶向库	1031 个
OA2600	MAPK1 ERK2 抑制剂库	197 个
OA2700	CDK2抑制剂库	670 个
OA2800	GSK3抑制剂库	479 个
OA2900	PKA抑制剂库	408 个
OA3000	PRMTs靶向库	842 个
OA3100	钙通道阻滞剂库	1008 个
OA3200	人前序列蛋白酶激动剂库	1050 个
OA3300	激肽释放酶 6 (KLK6) 靶向库	648 个
OA3400	Sh2结构域靶标库	1807 个
OA3700	Hsp90靶向库	648 个
OA3800	11β-HSD1 靶向库	924 个
OA3900	组织蛋白酶 K 靶向库	761 个
OA4000	DPP4 靶向库	653 个
OA4100	ERRγ靶向库	950 个
OA4200	糖皮质激素受体拮抗剂库	1026 个
OA4300	PARP-1靶向库	513 个
OA4400	SGLT2靶向库	674 个
OA4500	PKC-1抑制剂库	496 个
OA4600	Aurora B激酶抑制剂库	508 个
OA4700	BRD4抑制剂库	401 个
OA4800	酪蛋白水解蛋白酶 ClpP 靶向库	825 个
OA4900	Caspase 2靶向库	480 个
OA5000	CREBBP靶向库	576 个
OA5100	DAPK2抑制剂库	591 个
OA5200	DNMT1抑制剂库	466 个
OA5300	DNMT3b抑制剂库	1261 个
OA5400	DOT1L抑制剂库	622 个
OA5500	EZH2靶标库	979 个
OA5600	FGFR1K抑制剂库	485 个

编号	产品名称	化合物数量
OA5800	HAT抑制剂库	814 个
OA5900	HDAC抑制剂库	803 个
OA6000	Janus 激酶 2 (Jak2) 抑制剂库	625 个
OA6100	GASC1靶标库	966 个
OA6200	PAK1抑制剂库	606 个
OA6300	PDZ结构域靶标库	2010 个
OA6400	PI3K抑制剂库	364 个
OA6500	原癌基因酪氨酸激酶ABL1抑制剂库	771 个
OA6600	RNA靶标库	2894 个
OA6700	SARMs靶标库	1233 个
OA6800	SERMs靶标库	1210 个
OA6900	丝氨酸/苏氨酸激酶CHK1 抑制剂库	681 个
OA7000	S1PR1激动剂库	667 个
OA7100	S1PR1拮抗剂库	1215 个
OA7200	VEGFR2 激酶抑制剂文库	648 个
OA7300	病毒RNA 依赖性RNA 聚合酶靶标库	1706 个
OA7400	MMP2靶标库	726 个
OA7500	肾素靶标库	1001 个
OA7600	5-羟色胺受体 1B 拮抗剂库	1836 个
OA7700	GABAB 激动剂库	274 个
OA7800	GABAB 拮抗剂剂库	346 个
OA7900	组胺受体靶标库	1295 个
OA8000	肝X受体 (LXR) 靶标库	486 个
OA8100	RNA-RORγ靶标库	1326 个
OA8200	GABAA 激动剂库	396 个
OA8300	GABAA 拮抗剂剂库	543 个
OA8400	HCN通道阻滞剂库	657 个
OA8500	Kv1.5 钾通道阻滞剂库	940 个
OA8600	电压门控钠通道阻滞剂库	1477 个
OA9000	nAChR靶标库	640 个
OA9300	COMT靶标库	504 个
OA9400	转运蛋白调节剂库	525 个
OA9500	辅助转运蛋白靶标库	182 个
OA9600	HMG-CoA 还原酶抑制剂库	806 个
OA9700	PPI抑制剂I PPI Bayesian库	2637 个
OA9800	PPI抑制剂I PPI Tree库	1211 个
OA9900	SARS-CoV-2主要蛋白酶靶标库	1017 个
OT1000	p38 MAP 激酶 α 靶标库	592 个
OT1100	β-arrestin/β2-adaptn相互作用靶标库	1259 个
OT1200	雌激素受体α (ERα) 激动剂库	529 个

编号	产品名称	化合物数量
OT1300	雌激素受体α (ERα) 拮抗剂库	398 个
OT1400	雌激素受体α/β (ERα/ERβ) 激动剂库	556 个
OT1500	雌激素受体 α/β (ERα/ERβ) 拮抗库	511 个
OT1600	雌激素受体 β (ERβ) 激动剂库	416 个
OT1700	雌激素受体 β (ERβ) 拮抗剂库	464 个
OT1800	5-羟色胺 1A 拮抗剂库	600 个
OT1900	5-羟色胺激动剂通用库	199 个
OT2000	5-羟色胺拮抗剂通用库	290 个
OT2100	乙酰胆碱碱激动剂库	269 个
OT2200	乙酰胆碱酯酶 (AChE) 靶标库	828 个
OT2300	α肾上腺素受体拮抗剂库	1045 个
OT2400	血管生成抑制剂库	1625 个
OT2900	抗分枝杆菌库	1696 个
OT3400	Aurora A激酶抑制剂库	364 个
OT3500	Aurora C激酶抑制剂库	1162 个
OT3600	β分泌酶 1 (BACE1) 抑制剂库	342 个
OT3700	β-肾上腺素能受体激酶 (BARK)抑制剂库	1268 个
OT3800	C-Jun N-末端激酶 2 (Jn2) 抑制剂库	1774 个
OT3900	组织蛋白酶 B 靶标库	275 个
OT4000	组织蛋白酶 T 靶标库	1550 个
OT4100	检查点激酶 (CHK) 抑制剂库	593 个
OT4200	细胞周期蛋白依赖性激酶 4 (CDK4) 抑制剂库	798 个
OT4300	细胞周期蛋白依赖性激酶 5 (CDK5) 抑制剂库	893 个
OT4400	环氧化酶 1 抑制剂库	136 个
OT4500	死亡相关蛋白激酶 1 (DAPK1) 抑制剂库	1962 个
OT4600	死亡相关蛋白激酶 3 (DAPK3) 抑制剂库	1814 个
OT4700	内皮素受体拮抗剂通用库	165 个
OT4800	EphB2激酶抑制剂库	329 个
OT4900	表皮生长因子受体 (EGFR) 激酶抑制剂库	318 个
OT5000	G 蛋白偶联受体激酶 (GRK) 抑制剂库	1268 个
OT5100	GABA受体拮抗剂库	1133 个
OT5200	胰高血糖素受体拮抗剂库	526 个
OT5300	糖原合酶激酶 3 β (GSK3B) 抑制剂库	521 个
OT5400	GPCR激动剂通用库	465 个
OT5500	GPCR拮抗剂通用库	5089 个
OT5600	胍基乙酸激酶抑制剂库	254 个
OT5700	HCV 丝氨酸蛋白酶靶标库	1300 个
OT5800	组胺受体拮抗剂库	590 个
OT5900	Lombricine 激酶抑制剂库	163 个
OT6000	MAO B 抑制剂库	182 个

编号	产品名称	化合物数量
OT6100	MAP 激酶 (MAPK) 抑制剂库	102 个
OT6200	Metalloproteinase-9靶标库	608 个
OT6300	N-酰基甘露糖胺激酶抑制剂库	935 个
OT6400	NADH激酶抑制剂库	871 个
OT6500	神经肽拮抗剂库	106 个
OT6600	Opheline 激酶抑制剂库	875 个
OT6700	磷脂酰肌醇 3-激酶 C2 beta (PI3K-C2 beta) 抑制剂库	1183 个
OT6800	磷脂酰肌醇 3-激酶 C2 γ (PI3K-C2 γ) 抑制剂库	252 个
OT6900	血小板衍生生长因子受体 (PDGFR) 激酶抑制剂库	1972 个
OT7000	前列腺素拮抗剂库	665 个
OT7100	蛋白激酶 B (PKB) 抑制剂库	1070 个
OT7200	蛋白激酶 Ck1 抑制剂库	1387 个
OT7300	原癌基因酪氨酸蛋白激酶Fyn抑制剂库	481 个
OT7400	原癌基因酪氨酸蛋白激酶试剂盒抑制剂库	214 个
OT7500	Rho 相关激酶抑制剂库	344 个
OT7600	丝氨酸-苏氨酸激酶抑制剂库	213 个
OT7700	莽草酸激酶抑制剂库	453 个
OT7800	平滑肌肌球蛋白轻链激酶 (MLCK) 抑制剂库	627 个
OT7900	钠通道阻滞剂库	658 个
OT8000	鞘氨醇激酶抑制剂库	1119 个
OT8100	Src激酶抑制剂库	200 个
OT8200	牛磺胺激酶抑制剂库	875 个
OT8300	血栓烷拮抗剂库	133 个
OT8400	胸苷激酶抑制剂库	922 个
OT8500	类胰蛋白酶靶向库	139 个
OT8600	酪氨酸激酶抑制剂库	1147 个
OT8700	醋酸激酶抑制剂库	129 个
OT8800	腺苷受体拮抗剂库	110 个
OT8900	ADP-胸苷激酶抑制剂库	922 个
OT9000	多巴胺自身受体激动剂库	181 个
OT9100	Xa 因子靶标库	122 个
OT9200	GABA 受体激动剂库	117 个
OT9300	Ikappa B 激酶 2 (IKK2) 抑制剂库	347 个
PB1200	TyrosineK(v-Ab1)靶点库	208 个
PB1300	TPK1靶点库	290 个
PB1400	PKC靶点库	123 个
PB1500	P38靶点库	2775 个
PB1600	JNK靶点库	1696 个
PB1700	GSK3BETA靶点库	544 个
PB1800	ERB靶点库	1922 个

编号	产品名称	化合物数量
PB1900	CDK靶点库	1483 个
PB2000	Cb2靶点库	1770 个
PB2100	Cb靶点库	2267 个
PB2200	ADK靶点库	146 个
SC1100	激酶靶向库	2720 个
US2000	自噬库	14685 个
US2300	DCLK1调节剂库	763 个
US2400	DYRK1A/B调节剂库	472 个
US2500	GPCR调节剂库	19673 个
US2600	Hedgehog通路调节剂库	641 个
US2700	Hippo调节剂库	2608 个
US2800	离子通道调节剂库	3081 个

编号	产品名称	化合物数量
US2900	通用激酶库	6471 个
US3400	PPI调节剂库	6433 个
US3500	蛋白酶抑制剂库	500 个
US3700	选择性雄激素受体调节剂库	590 个
US3800	选择性雌激素受体调节剂库	376 个
US4100	转运体调节剂库	2065 个
US4200	微管抑制剂库	2003 个
US4400	Wnt 通路调节剂库	4543 个
VM1000	离子通道调节剂库	6800 个
VM1100	蛋白激酶调节剂库	5900 个
VM1200	蛋白酶调节剂库	2500 个

编号	产品名称	化合物数量
DO1100	新农药库	50000 个
DO1300	靶点鉴定表型筛选库	35000 个
DO1500	螺环化合物库	19000 个
DO1600	肽模拟物库	38400 个
DO2200	共价抑制剂库	12000 个
DO2300	高频命中化合物库	9000 个
DO2400	大环库	3300 个
DO2500	β 转角结构肽模拟物库	2679 个
DP2000	识别元件PPI库	26000 个
DP2360	治疗多样性活性库	7567 个
DP2380	类固醇化合物	543 个
DP2390	化学基因组活性库	99000 个
DP2480	PPI三肽模拟物库	25000 个
DP2490	PDZ PPI库	4000 个
DP2550	非肽类肽模拟物库	22000 个
DP3300	Eccentric PPI库	13000 个
DP3580	α 螺旋模拟物库	24737 个
DP4200	Cyclic Ugi PPI库	10000 个
DP4550	嘌呤能库	3500 个
DP9600	嘌呤衍生物	12000 个
DP9700	无生物学活性库	25000 个
DS1000	上市药物类似物库	1400 个
DS2000	三唑类化合物库	4000 个
EN1300	表型筛选库	5760 个
EN1400	共价筛选库	10800 个
EN1500	农药类似物库	10240 个
EN2400	糖苷模拟物库	2470 个
EN3500	分子伴侣靶向库	2468 个

编号	产品名称	化合物数量
EN3600	核苷模拟物	290 个
EN3700	蛋白结构模拟物库	8960 个
EN5600	冠状病毒Mpro共价库	2640 个
LF1100	农用化学品筛选库	12600 个
LF2500	靶向蛋白质降解的降解砌块库	1700 个
LF2600	去泛素化酶筛选库	3300 个
LF6000	拟肽化合物库	5800 个
LF7000	兽药靶向库	238 个
LF9000	半胱氨酸靶向共价抑制剂库	3400 个
LF9100	丝氨酸靶向共价抑制剂库	2700 个
OA3500	表型筛选库	5000 个
OA5700	拟糖靶向库	233 个
OA8700	杀菌剂类似物库	1964 个
OA8800	杀虫剂类似物库	2137 个
OA8900	除草剂类似物库	2080 个
OA9100	α -螺旋拟肽库	1234 个
OA9200	β -Turn 拟肽库	1054 个
PB1000	PPI靶向的分子砌块库	400 个
PB1100	3D分子砌块	453 个
PB2300	大环库	1584 个
SC1300	老药新用库	5691 个
US1700	农药库	18064 个
US2200	共价修饰剂库	28572 个
US3100	大环骨架库	9737 个
US3300	多羟基化合物库	16911 个
US3900	Sh2结构域调节剂	2406 个
US4000	类脂化合物库	20542 个

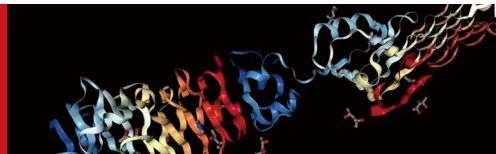
特色多样性化合物库



编号	产品名称	化合物数量
AC1200	新一代大环化合物库	4587 个
AC1600	半合成生物碱库	7709 个
AC1700	半合成蒽类库	2366 个
AC1800	半合成糖类库	5419 个
AC1900	半合成氨基酸类库	10945 个
AC2000	半合成结构多样库	4923 个
AC2200	半合成大环化合物库	2368 个
AN1300	“Signature” 专用库	5556 个
AN1400	预制大环库	25261 个
AN1500	蛋白相互作用预制库	3743 个
AN1700	糖苷模拟物预制库	2430 个
AN1800	核苷模拟物预制库	3661 个
AN2000	共价抑制剂预制库	1000 个
AN2200	表型预制库	13159 个
AN2400	按需合成的共价库	12032 个
AN2500	DNA编码砌块库	1377 个
AN2700	α -螺旋模拟物库	6867 个
AN2800	蛋白相互作用非大环库	11439 个

编号	产品名称	化合物数量
AN2900	蛋白相互作用大环库	3118 个
AN3000	蒽类模拟物库	4278 个
AN3100	糖苷模拟物库	4292 个
AN3200	大环糖苷模拟物库	1412 个
AN3300	大环库	10091 个
AN3600	核苷模拟物库	3118 个
AN3700	RNA核苷模拟物库	842 个
AN3800	软亲电化合物库	8085 个
AN5100	农用化学品和作物保护库	13524 个
AN5400	类固醇模拟物库	1456 个
CB1300	大环库	13000 个
CB1400	螺旋环库	50000 个
DD2800	3D模拟物PPI库	2000 个
DD3400	嘌呤核苷库	1257 个
DD3500	核苷模拟物库	2503 个
DD5300	脂质代谢库	9000 个
DD5700	半胱氨酸靶向共价库	39301 个
DF4100	Smart共价抑制剂库	1950 个

通用片段库



精选片段库 —— 246 个小分子

L5700

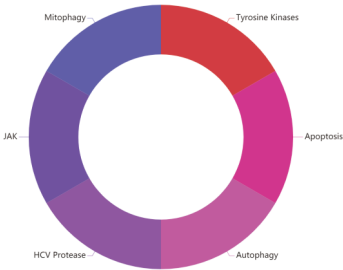
基于片段的筛选和药物发现 (FBDD) 已被证明是一种寻找新药的有效方法, 如今 FBDD 发现的一些化合物正在进入临床, FBDD 已成为替代传统上通过高通量筛选 (HTS) 发现先导化合物的新方法。FBDD 为先导化合物和新药的开发提供了新的契机, 吸引着各大制药公司和学术机构。与 HTS 不同, FBDD 能发现更小的化合物, 即“片段”化合物。由于片段化合物对生物靶标的亲和力低, 必须采用高灵敏度的分析技术来检测它们的结合, 比如高分辨率 NMR 光谱、质谱以及 X 射线晶体学等。FBDD 具有优于 HTS 的方面: (1) 节约筛选成本, 提高筛选效率: 筛选较少数量的片段化合物, 其配对组合覆盖了与 HTS 相比更大的化学空间, 效率更高, 相对也更利于实验经费的优化; (2) 提高成药性: FBDD 为最终的先导化合物具备类药性质提供了更好的机会, 由于片段分子小更易于后期进行结构优化, 而且通过 FBDD 方法开发的分子往往具有较高的配体效率和明确的构效关系数据, 以这些数据作为药物分子优化指导可以大大提高片段化合物的成药性, 加快研发进程。

TargetMol 为您提供包含 246 个实体片段小分子的库, 希望为您的新药研发助一臂之力!

◎ 化合物库规格及组成

PACK SIZE

1 mg
5mg
10mg



高溶解性片段库 —— 2,746 个小分子

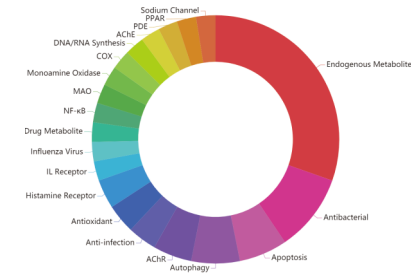
L7800

FBDD 方法的前提是建立高品质的片段库, 片段分子往往需要满足“三规则”, 分子量小于 300, 氢键供体和受体不超过 3, 可旋转键数目不超过 3, cLogP 小于 3。高溶解性片段库按照“三规则”建立, 绝大部分片段分子量小于 300, 氢键供体与受体数量均不高于 3, 且每个片段均测试过溶解度: DMSO (200 mM) 与 PBS (1 mM)。

◎ 化合物库规格及组成

PACK SIZE

1 mg
5mg
10mg

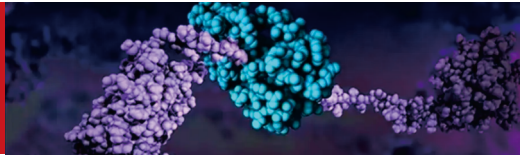


更多通用片段库

编号	产品名称	化合物数量
BN1100	二代高端片段库	1166 个
CB2400	片段库	13500 个
DF1000	片段库	11269 个
DF2000	3D片段库	4500 个
EN4300	必备片段库	320 个
EN4500	DSI专用库	860 个
EN4600	Mini片段库	80 个
EN5100	3D多样性片段库	1200 个
LF7600	通用片段库	50600 个
LF7700	有实验溶解度的片段库	20000 个
LF7800	可溶性片段的多样性筛选子库	1280 个
LF7900	富含Fsp3的片段库	18400 个

编号	产品名称	化合物数量
LF8000	3D片段库	3100 个
LF8100	低分子量片段库	7100 个
OA1000	通用片段库	13685 个
OA1200	溶解性片段库	1021 个
PB2500	Fsp3富集片段库	11089 个
PB2600	通用片段库	29212 个
SC1200	片段库	4536 个
US1100	通用片段库	11564 个
US1300	溶解性片段库	880 个
US1400	饱和片段库	3010 个
US1500	精选片段库	1316 个
US1600	形状多样性片段库	571 个

特色片段库



高溶解性多官能团片段库 —— 1,159 个小分子

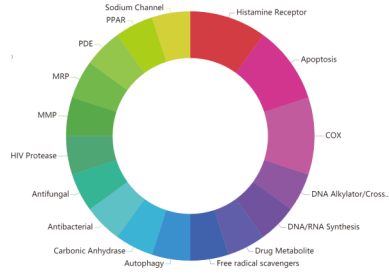
L7810

高溶解性多官能团片段库的设计原则是, 为化学合成提供性价比高, 反应快速的稳定片段化合物。稳定的片段包含至少两个可参与化学反应的官能团。这些反应包括酰胺偶联、铃木型芳基-芳基偶联和还原胺化等。高溶解性多官能团片段库包含 1,159 种片段分子

◎ 化合物库规格及组成

PACK SIZE

1 mg
5mg
10mg



片段库

高溶解性微型片段库 —— 1,082 个小分子

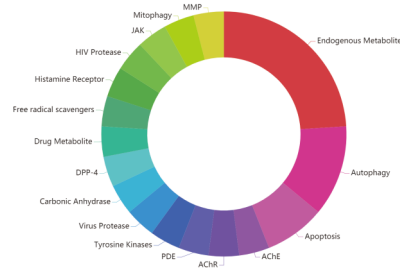
L7820

高溶解性微型片段化合物库由 1,082 个低分子量片段组成。低分子量化合物 (所谓的微型片段) 源自市售的片段空间, 重点在于确保化合物的化学稳定性, 不存在反应性化合物, 符合筛选的理化特性, 不严格遵守药物相似性标准 (因为药物设计是主要但不是独家应用), 化合物的结构多样性/覆盖范围更广化学空间, 旨在为新药发现及药物设计领域提供命中药物靶点。

◎ 化合物库规格及组成

PACK SIZE

1 mg
5mg
10mg



高溶解性片段药效团库 —— 985 个小分子

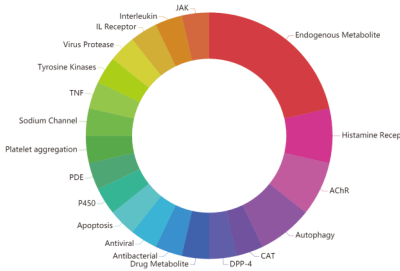
L7830

基于片段的药物设计引入了自下而上的药物开发过程, 改善了化学空间的多样性并提高了早期药物发现的有效性。我们将药效团的使用 (代表药物 - 靶标相互作用的最一般概念) 与蛋白质热点理论相结合, 为片段库开发设计方案。SpotXplorer 方法编译小片段文库, 在最优选的热点上最大限度地扩大实验证实的结合药效团的覆盖范围。我们精心挑选的高溶解性片段药效团库包含 985 个片段小分子。

◎ 化合物库规格及组成

PACK SIZE

1 mg
5mg
10mg



高溶解性 3D 结构多样性片段库 —— 1,083 个小分子

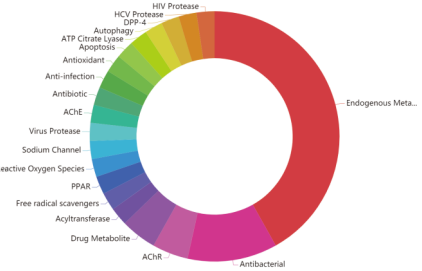
L7850

高溶解性结构多样性片段化合物库以高效和模块化的方式构建, 因此非常适合解决需要大量合成投资才能实现多向片段增长这一现状。结构多样性片段被设计为包含合适的合成反应基团, 用于未来的片段增长。高溶解性 3D 结构多样性片段库包含 1,083 个化合物。

◎ 化合物库规格及组成

PACK SIZE

1 mg
5mg
10mg



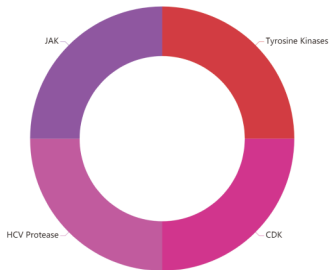
Mini 片段亲电杂环库 —— 371 个小分子

L7860

由于筛选亲电子片段成为发现和验证新靶标并生成可行的化学起点的有前途的替代方案, 我们设计了一个 Mini 片段亲电杂环库。这些化合物基本上是共价 MiniFragments , 包含具有吸电子特性的五元和六元含氮杂环, 可激活小的亲电取代基 (卤素、乙炔基、乙烯基和腈基团)。该文库不仅包含小的亲电子杂环, 还包含其反应性增加的 N - 季铵化类似物, 总计 371 个化合物。

化合物库规格及组成

PACK SIZE
1 mg
5mg
10mg



药物片段库 —— 1,159 个小分子

L8800

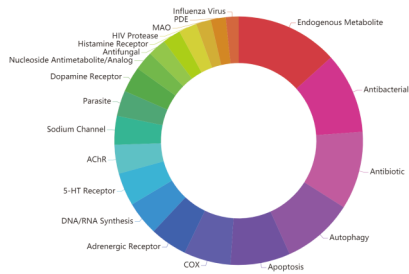
近年来, FBDD 方法受到许多药物研发人员的关注。利用 FBDD 方法已成功产生了 3 种上市药物 (Vemurafenib、Venetoclax 和 Erdafitinib) 和 30 多种临床期药物, 表明该技术具有较好的应用前景。

同一药物的不同分子片段可以分别出现在其他的药物结构中, 这些片段结构与药物的药理药效性质存在一定的相关性, 利用这些片段分子进行药物设计可能更容易寻找到具有理想药物性质的活性先导化合物。

高质量的片段库能够提高 FBDD 筛选命中率, 增加筛选成功率。TargetMol 对 2,080 种上市药物和 1,100 种临床期药物进行片段化处理和层层筛选, 构建了一个由 1,159 种片段分子组成的药物片段库, 是基于 FBDD 药物筛选的必备工具。

化合物库规格及组成

PACK SIZE
30 μ L * 10 mM (in DMSO)
100 μ L * 10 mM (in DMSO)
1 mg
5 mg
10 mg

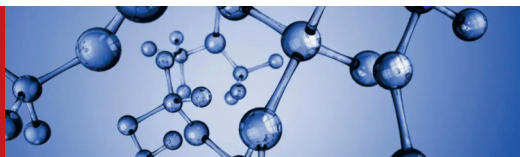


更多特色片段库

编号	产品名称	化合物数量
AC1100	天然片段库	0 个
AN2600	靶向RNA片段库	1065 个
EN4400	高保真片段库	1920 个
EN4900	全功能化探针库	640 个
EN5000	天然产物类似片段库	4160 个
EN5200	蛋白相互作用片段库	3600 个
EN5300	单药效团片段库	1500 个

编号	产品名称	化合物数量
EN5400	羧酸片段库	4000 个
EN5500	亲电共价探针库	960 个
LF8500	PPI 片段库	10900 个
LF8600	天然产物类似的片段库	3100 个
LF8900	螯合剂片段库	1580 个
OA1300	螯合剂片段库	2022 个

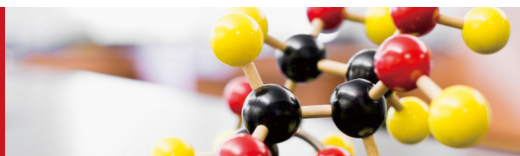
NMR 和晶体片段库



编号	产品名称	化合物数量
BN1000	含氟片段库	719 个
BN1300	含溴片段库	1653 个
DF3000	含氟与含溴片段库	2109 个
EN4800	含氟片段库	1000 个
LF8200	含氟片段库	6000 个
LF8300	含氟片段Cocktail	1400 个

编号	产品名称	化合物数量
LF8400	含溴片段库	2100 个
OA1100	含氟片段库	1375 个
OA1400	含溴片段库	708 个
PB2400	含氟片段库	9633 个
US1200	含氟片段库	2739 个

共价片段库



编号	产品名称	化合物数量
BN1200	硼酸片段库	514 个
DF4000	Smart共价片段库	799 个
EN4700	共价片段库	6120 个
EN5700	半胱氨酸靶向共价片段库	3200 个
EN5800	丝氨酸靶向共价片段库	1600 个

编号	产品名称	化合物数量
EN5900	赖氨酸靶向共价片段库	1600 个
LF8700	共价片段库	4000 个
LF8800	特异性共价抑制剂片段库	600 个
US1000	共价片段库	2803 个

文献引用



Nature. Volume 582; 289–293.

Structure of Mpro from COVID-19 virus and discovery of its inhibitors



Nat Biotechnol. Volume 39; 1444–1452.

Prediction of drug efficacy from transcriptional profiles with deep learning



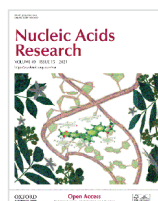
Nature Genetics. Volume 50; 1666–1673.

Cilia-driven cerebrospinal fluid flow directs expression of urotensin neuropeptides to straighten the vertebrate body axis



Volume 35(1); 125–139.

The ERBB-STAT3 axis drives Tasmanian devil facial tumor disease



2021 Sep 7;49(15):8974–8986.

Small-molecule compounds boost genome-editing efficiency of cytosine base editor

High-throughput drug screening and IC₅₀ measurement
Potential inhibitors against SARS-CoV-2TM were screened by an enzymatic inhibition assay. When the different compounds were added.
Five drug libraries—the Approved Drug Library (TargetMol),
Clinic Compound Library (TargetMol),—that together
comprised about 10,000 compounds were used.
for Advanced Immunochemical Studies)—that together comprised
about 10,000 compounds were used. The preliminary screening reaction
mixture included 0.2 μM protein, 20 μM substrate and 50 μM

**Fig. 4a and 5b, we plotted b versus -a; thus, the upper right corner shows positively
predicted molecules. In Figs. 3a and 4b, we plotted the first (b - a) versus the second
(b - a); again, the upper right corner shows positively predicted molecules.**
In this research, a natural compound library (L6000,
TargetMol, n=2,719) and an FDA-approved library (L4200,
TargetMol, n=961), merged as D3680, were used to screen the
positive chemicals in obesity and HU A.
Identification of gene signatures. In HUA, the inflammation/fibrosis gene
signatures were generated by the combination of fetal tracheal cells (CCT2), carrying the

possibility of mechanical signaling affecting body-axis development, we injected
artificial CSF (118 mM NaCl, 2 mM KCl, 10 mM MgCl₂, 10 mM HEPES, 10 mM
glucose) into the brain ventricle, after draining endogenous CSF.
The GPCR compound library was purchased from Target
Molecule Corporation, and contains 356 active compounds
that target G proteins and GPCRs.
each. Control embryos were treated with dimethylsulfoxide (DMSO) only. At
3 d.p.f., embryos with body-curvature defects were scored. Usually we identified
five to eight embryos with varying degrees of body curvature. We took images



Volume 137(11): 1478–1490.

Targeting the Otub1/c-Maf axis for the treatment of multiple myeloma



2022 Jan 17;61(3):e202113515.

Multiplexed Small-Molecule-Ligand Binding Assays by Affinity Labeling and DNA Sequence Analysis

- Yi Zang et. al., High-throughput screening of SARS-CoV-2 main and papain-like protease inhibitors, Protein & Cell, 2022;
- Yang, Joey Yi, et al. Chemical-induced degradation of PreS2 mutant surface antigen via the induction of microautophagy. Antiviral Research (2022): 105417.
- Xu, He, et al. Investigating and Resolving Cardiotoxicity Induced by COVID - 19 Treatments using Human Pluripotent Stem Cell - Derived Cardiomyocytes and Engineered Heart Tissues. Advanced Science (2022): 2203388.
- Chen, Kuang-Yu, et al. A highly sensitive cell-based luciferase assay for high-throughput automated screening of SARS-CoV-2 nsp5/3CLpro inhibitors. Antiviral research 201 (2022): 105272.
- He, Yue, et al. Coptisine: A natural plant inhibitor of ruminal bacterial urease screened by molecular docking. Science of The Total Environment 808 (2022): 151946.
- Ou, Ling, et al. Verdinoxor, a Selective Inhibitor of Nuclear Exportin 1, Inhibits the Proliferation and Migration of Esophageal Cancer via XPO1/c-Myc/FOSL1 Axis. International journal of biological sciences 18.1 (2022): 276.
- Wang, Jing, et al. Single-cell multiomics sequencing reveals the reprogramming defects in embryos generated by round spermatid injection. Science advances 8.31 (2022): eabm3976.
- Swale, Christopher, et al. Alitratinib blocks Toxoplasma gondii and Plasmodium falciparum development by selectively targeting a spliceosome kinase. Science Translational Medicine 14.656 (2022): eabn3231.
- Shi, Yuanyuan, et al. A small molecule promotes cartilage extracellular matrix generation and inhibits osteoarthritis development. Nature communications 10.1 (2019): 1-14.
- Liu, Lin, et al. Repurposing the FDA - approved anticancer agent ponatinib as a fluconazole potentiator by suppression of multidrug efflux and Pma1 expression in a broad spectrum of yeast species. Microbial biotechnology 15.2 (2022): 482-498.
- Zhao, Tianyuan, et al. Small-molecule compounds boost genome-editing efficiency of cytosine base editor. Nucleic acids research 49.15 (2021): 8974-8986.
- Cai, Bo, and Casey J. Krusemark. Multiplexed Small - Molecule - Ligand Binding Assays by Affinity Labeling and DNA Sequence Analysis. Angewandte Chemie 134.3 (2022): e202113515.
- Zhu, Jie, et al. Prediction of drug efficacy from transcriptional profiles with deep learning. Nature biotechnology 39.11 (2021): 1444-1452.
- Lin, ChangDong, et al. Ceftazidime is a potential drug to inhibit SARS-CoV-2 infection in vitro by blocking spike protein-ACE2 interaction. Signal transduction and targeted therapy 6.1 (2021): 1-4.
- Tang, Jiang-Jiang, et al. Cognitive enhancement and neuroprotective effects of OABL, a sesquiterpene lactone in 5xFAD Alzheimer's disease mice model. Redox Biology 50 (2022): 102229.

★ 查看更多产品及引用文献请登录 www.tsbiochem.com

常见问题回答

Frequently Asked Questions

1 收到产品之后怎么处理？

收到化合物库后，建议先对其进行离心操作，因为化合物在运输过程中会由于颠簸等原因沾在管壁或者盖子上，离心有助于减少不必要的浪费，可以用离心机点甩一下。一般可以选择如 Eppendorf 这类大离心机点甩。

2 怎样选择溶剂？

(1) 对于粉末化合物板，配制溶剂需要较高的通用性，实验室中普遍采用二甲基亚砜 (DMSO)，这种溶剂对化合物的溶解性较好且具有一定的抑菌防腐作用，防止化合物的污染，同时它的沸点较高不易挥发。库的母液配制浓度以 10 mM 最为常用。

(2) 整板配制时，加入 DMSO 后可以通过轻型震荡仪摇匀，如果部分化合物难以溶解，可放置于 37°C 水浴中超声，待完全溶解后，离心并加盖妥善保存于 -20°C。如果化合物库的成分不稳定也可放置于 -80°C 保存。

(3) 有些化合物可以加入盐酸或者氨水来促进溶解。

3 怎样正确存储？

(1) 母板

配制好的化合物库板可称之为母板，母板多放置在深孔板中作为储存备用，应尽量减少环境的变化和频繁的使用，有利于化合物的长期保存。

(2) 子板

作为日常使用时，可从母板中取出 30-50 μL 化合物放置于对应的 PP 材质 96 孔板材中，布局与母板对应，称之为子板。作为常规试验使用时方便快捷，利于机器操作提高工作效率。同时一旦使用时出现意外可减少化合物的损失和后续污染溯源的问题。子板短期内可置于 4°C 冰箱中取用。

(3) 工作板

到了实验阶段，一般可根据试验需求取出一定量的化合物进行稀释后使用，选择合适的高通量筛选板开展实验。

4 化合物库初筛浓度如何设置？

初筛的目的是检验细胞对某化合物是否具有活性，所有化合物采用通用浓度即可，不需根据 IC50 等单独配制。我司化合物均以 DMSO 溶液形式保存，浓度为 10 mM，根据来自国家新药筛选中心——小分子化合物资源中心的建议，如果活性筛选体系是 100 μL ，初筛浓度为 30 μM 。则 1 μL 10 mM 的化合物母液可用于 3 复孔的检测。以上意见仅供参考，具体初筛浓度建议您根据具体筛选模型和实验方法进行调整。