



# COMPOUND LIBRARY

陶术·化合物库目录





# ● 一、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 上市状态分类

临床前化合物库	.....04
临床药物库	.....04
FDA 上市药物库	.....07
上市药物库	.....10

## 1.2 疾病类型分类

抗癌化合物库	.....13
抗癌活性化合物库	.....16
抗癌药物库	.....16
抗癌上市药物库	.....17
抗癌临床化合物库	.....17
抗癌细胞代谢库	.....18
癌细胞分化化合物库	.....18
肿瘤免疫治疗小分子库	.....19
抗肿瘤库 Plus	.....19
抗肺癌化合物库	.....20
抗病毒库	.....20
抗感染化合物库	.....21
抗糖尿病库	.....21
抗真菌库	.....22
抗寄生虫库	.....22
抗菌活性库	.....23
神经退行性疾病化合物库	.....23
神经系统库	.....24
免疫 / 炎症分子化合物库	.....24
抗代谢疾病化合物库	.....25
抗心血管疾病化合物库	.....25
抗肥胖化合物库	.....26
血液病分子库	.....26

## 1.3 新冠专题

抗 COVID-19 化合物库	.....27
抗 COVID-19 CADD 活性库	.....27
3CLpro 靶向化合物库 (CADD)	.....28
ACE2 靶向化合物库 (CADD)	.....28
RBD 靶向化合物库 (CADD)	.....28
nsP15 靶向化合物库 (CADD)	.....29
nsP16 靶向化合物库 (CADD)	.....29

PLpro 靶向化合物库 (CADD)	.....30
RdRP 靶向化合物库 (CADD)	.....30
X 结构域靶向化合物库 (CADD)	.....30

## 1.4 通路靶点分类

蛋白酶抑制剂库	.....31
表观遗传库	.....31
抑制剂库	.....35
PI3K/Akt/mTOR 化合物库	.....35
MAPK 抑制剂库	.....36
GPCR 靶点分子库	.....36
GPCR 库 Plus	.....37
核受体化合物库	.....37
激酶抑制剂库	.....38
酪氨酸激酶分子库	.....38
神经信号分子库	.....39
神经递质受体化合物库	.....39
肾上腺素能受体化合物库	.....40
5-羟色胺分子库	.....40
自噬库	.....41
组胺 & 褪黑色素化合物库	.....41
细胞因子抑制剂库	.....42
JAK-STAT 化合物库	.....42
NF-κB 信号通路分子库	.....43
DNA 损伤和修复分子库	.....43
DNA 损伤 / 修复库 Plus	.....44
TGF-β/Smad 靶点化合物库	.....44
Wnt/Hedgehog/Notch 库	.....45
血管生成库	.....45
线粒体靶向库	.....46
离子通道库	.....46
钙通道分子库	.....47
钾通道分子库	.....47
钠通道分子库	.....48
趋化因子抑制剂库	.....48
细胞周期化合物库	.....49
HIF-1 化合物库	.....49
泛素化化合物库	.....50

铁死亡化合物库	.....50
细胞凋亡化合物库	.....51
磷酸酶抑制剂库	.....51

## 1.5 特色活性库

经典已知活性库	.....52
经典已知活性库补充库	.....55
已知活性库 Plus	.....56
3D 已知活性库	.....56
药物功能重定位库	.....57
转录因子库	.....57
核苷酸类化合物库	.....58
内分泌激素分子库	.....58
人内源代谢化合物库	.....59
氧化还原化合物库	.....59
造血毒性小分子库	.....60
组蛋白修饰化合物库	.....60
抗生素库	.....61
心血管毒性库	.....61
含氟化合物库	.....62
毒性化合物库	.....62
药物代谢杂质库	.....63
血脑屏障通透化合物库	.....63
活性脂质化合物库	.....64
凝血与抗凝化合物库	.....64
神经再生化合物库	.....65
成骨分子库	.....65
干细胞分化化合物库	.....66
抗衰老化合物库	.....66
染色质修饰分子库	.....67
大环化合物库	.....67
PPI 抑制剂库	.....68
表型筛选靶点鉴定库	.....68

## 1.6 新增化合物库

FDA 上市及药典收录分子库	.....69
肝脏毒性化合物库	.....69
共价抑制剂库	.....70

# ● 二、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

## 2.2 可单独挑选天然产物

天然产物单体化合物库	.....74
------------	---------

## 2.3 天然产物衍生物

Natural-Product-Based Library	.....74
-------------------------------	---------

## 2.4 中国药典收录天然产物库

2.5 特色天然产物库	.....75
-------------	---------

生物碱类天然产物库	.....76
-----------	---------

萜类天然产物库	.....76
---------	---------

黄酮类天然产物库	.....77
----------	---------

中药抗炎分子库	.....77
---------	---------

植物来源化合物库	.....78
----------	---------

天然多酚类化合物库	.....78
-----------	---------

药食同源库	.....79
-------	---------

微生物天然产物库	.....79
----------	---------

胃肠炎天然产物库	.....80
----------	---------

抗癌天然产物库	.....80
---------	---------

## 2.6 新增化合物库

糖类及苷类化合物库	.....81
-----------	---------

藏药化合物库	.....81
--------	---------

抗 COVID-19 中药单体库	.....82
------------------	---------

### ● 三、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 CADD 化合物库

计算机辅助药物设计库 .....83

#### 3.2 高通量 & 高内涵化合物库

Mini 骨架库 .....86

Golden 骨架库 .....86

药物靶点库 .....87

Pre- 多样性库 .....87

多样性库 .....88

多样性定制库 .....89

#### 3.3 按疾病类型分类(计算机预测) .....90

3D Mimetics PPI Library

Angiogenesis library

Anti-Aging Library

Antibacterial compounds library

Anticancer Library

Antifungal Library

Anti-HIV1 Library

Anti-infective Library

Anti-Inflammatory Library

Antimitotic Library

Antimitotic Tubulin Library

Antiparasite library

Antiviral HBV

Antiviral Library

Cancer Stem Cells Targeted Library

Cardiovascular Library

CNS BBB library

CNS Library

CNS MPO Library

CNS targets activity set

Immunological Library

Neuropeptide S Library

#### 3.4 按通路靶点分类(计算机预测) .....90

Adenosine Receptors Targeted Library

Akt-Targeted Library

Allsteric Kinases Inhibitors Library

Alpha-Helix Mimetics Library

Androgen Receptor Antagonists Library

Apoptotic Library

Aurora A-B Kinases Library

Autophagy-Targeted Library

BCL2 Targeted Library

Beta 2 Adrenoligands Library

BRD4 targeted library

Calcium Channels Library

CXCR4-Targeted Library

Cyclic Ugi PPI Library

Developmental Pathway (Hh/Wnt) Set

DGK Inhibitors Library

DNMT-Focused Library

Eccentric PPI Library

Epigenetics Library

Epitranscriptome Focused Small Molecule Library

G9a-Inhibitors Library

GABA Targeted Library

Glucocorticoid receptors Library

GP-120 & GP-41 Libraries

GPCR Target Platform Library

GSK3 $\beta$ -Targeted Library

h-TERT Targeted Library

HA2 Library

HDAC Library

Hedge Hog Pathway PPI Library

Hsp90-Targeted Library

Human GPCR Annotated Library

Human Ion Channels Annotated Library

Human Kinases Annotated Library

Human Phosphatases Annotated Library

Human Proteases Annotated Library

Human Receptors Annotated Library

Human Transcription Factors Annotated Library

INTEGRIN Receptors Targeted library

Ion Channels Target Platform Library

KRAS-Targeted Library

Library of Small Molecule Inhibitors of beta-Catenin Signaling

Ligand-Gated Ion Channels Library

MDM2 focused Library

MDM2-p53 interaction inhibitors Library

MEF2-HDAC (class II) Modulators Library

Monoamine Transporters Library

Na<sup>+</sup> Channels Blockers/Antagonists Set

Neurotransmitter Transporter Inhibitors library

NFkb-Regulators Library

NR-Focused Library

Nucleic acid ligands

P24-Targeted Library

Phosphatase Inhibitors

PI3K-Targeted Library

Polymerase Library

PPI CDI Library

PPI Helix Turn Mimetics Library

PRMT Library

Proline Kinase Library

Protein Kinases Target Platform Library

Recognition Elements PPI Library

RPTP Targeted Library

SH2 Library

SH2 PTB Focused Library

STING Agonist Library

Targeted Diversity Library

Type II Kinase Inhibitors Library

#### 3.5 Fragment 片段库

FBDD 片段库 .....92

精选片段库 .....93

高溶解性片段库 .....93

药物片段库 .....93

3D 片段库 .....94

片段库 .....94

#### 3.6 特色类药性化合物库 .....94

AgroChemical Library

Beyond the Flatland Library

Bromodomains Library

ChemoGenomic Annotated library for Phenotypic Screening

Chemokines Library

Covalent inhibitors Library

Dark Chemical Matter Library

DGK Inhibitors Library

Frequent Hitters Library

Indoleamine 2,3-dioxygenase 1 focused library

Macrocycles Library

Matrix Metalloproteinases Targeted Library

Nucleoside Mimetics Library

Peptidomimetic Library

Peptidomimetics of Beta-Turn Motifs Library

Purine Based Nucleoside Library

Regenerative Medicine Focused Library

Selective Target Activity Profiling library

Shape Helix Mimetics PPI Library

Soluble Diversity Library

Spiro-library

Target Identification, Phenotypic Screening library (TIPS)

Therapeutic Diversity Annotated Library

## 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、Datesheet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	$\leq 50\mu\text{l}$	$>50\mu\text{l}$	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	10 mM DMSO		
保存温度	$-20^{\circ}\text{C}$ (短期保存) $-80^{\circ}\text{C}$ (长期保存)		

# 通用已知活性库



## 临床前化合物库-450 个小分子

### Catalog No.L3410

450个临床前小分子化合物的独特集合，靶点明确，有详细的临床分期和适应症信息，可用于高通量、高内涵筛选。

Pack Size	Price
100 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 44,100.00
250 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 72,000.00
1mg	RMB 72,000.00

## 临床药物库 -1336 个小分子

### Catalog No.L3400

#### 产品描述

临床期小分子药物库汇集了1336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。

#### 产品特性

- 1336种进入临床期研究的分子集合；
- 临床一期、二期、三期阶段分类详细，便于选择使用；
- 丰富的药理与靶点研究数据，加快研发进程；
- 囊括多种热门病症对应的临床期化合物，覆盖面广。

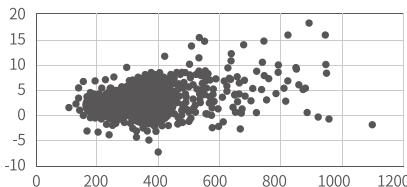
Pack Size	Price
100 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 130,260.00
250 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 213,760.00
1mg	RMB 213,760.00

## 类药性参数分析

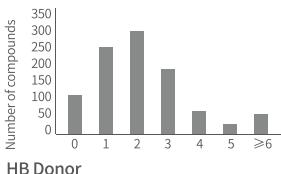
### % of compounds compliant with Lipinski's Rules

PhysChem Properties	% Compounds
<5 HBond donors	94
<10 HBond acceptors	88
cLogP<5	87
MW<500	78

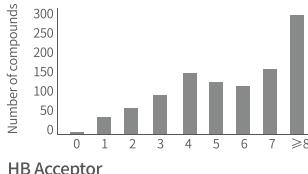
cLogP vs MW



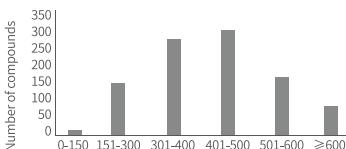
### Distribution of HB Donors



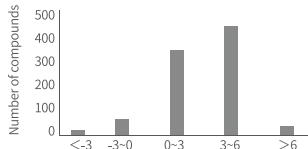
### Distribution of HB Acceptors



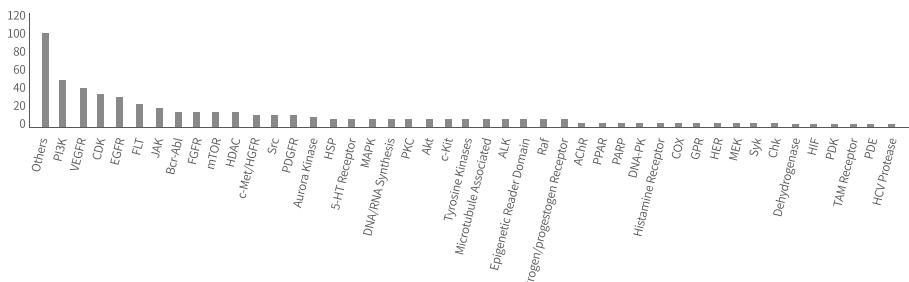
### Distribution of Molecular weight

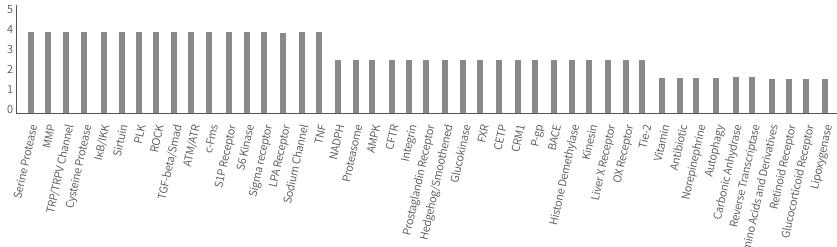
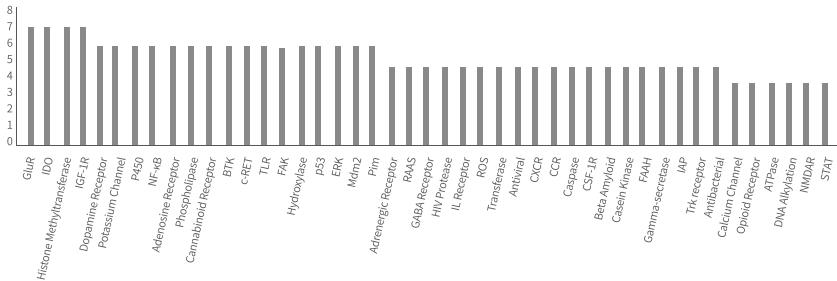


### Distribution of cLogP

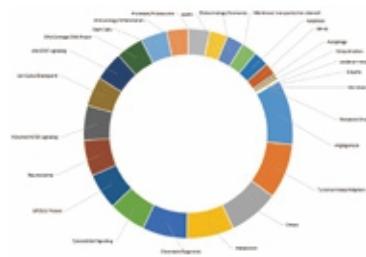


## 靶点组成

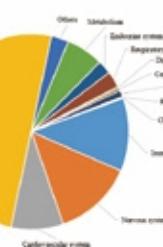




## 信号通路组成



## 适应症组成



## 其他相关化合物库推荐

名称	数量	描述
上市药物库 (详见第10页)	2272	上市药物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,是老药新用、新的药物靶点筛选的有效工具;由于活性明确,靶点已知,也可以用于细胞诱导分化。
经典已知活性库 (详见第52页)	7065	经典已知活性库是7065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。
天然产物库 (详见第71页)	2592	来源清晰:精选来自动物、植物、微生物的已知活性天然产物;更具体到植物种类,并标注准确英文名与拉丁名,方便后期研究确证。结构多样性好:2592种天然产物,含包括黄酮类、生物碱类在内的30多种化合物类型,拥有详细的分类信息。信息全面:从化合物结构到溶解度,从信号通路、作用靶点到生物活性信息均有详细描述。性价比高:剔除了价格昂贵但成药性差的天然产物,用更少的成本得到更多高品质的天然产物。

# FDA上市药物库-1403 个小分子

Catalog No.L4200

## 产品描述

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最理想的工具。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。

## 产品特性

- 数量丰富** 1403个FDA批准药物的独特集合，是用于药物功能重定位、新的药物靶点筛选的有效工具；
- 覆盖面广** 涵盖多个通路、靶点和研究领域，充分满足您的科研需求；
- 信息详实** 详细的说明书，化合物结构、靶点信息、IC50值、活性描述等，且全部提供FDA批准编号；
- 品质保证** NMR、HPLC/LCMS等多种检测技术保证产品结构正确，纯度高，减少假阳性。



### Pack Size

### Price

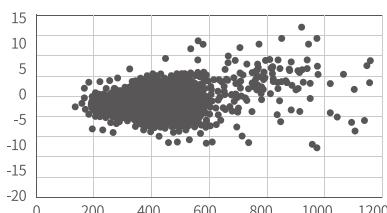
100 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 79,110.00
250 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 109,835.00
1mg	RMB 109,835.00

## 类药性参数分析

% of compounds compliant with Lipinski's Rules

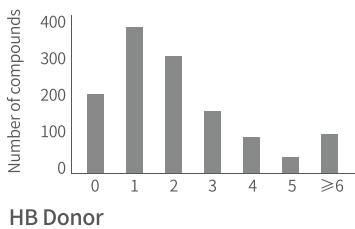
PhysChem Properties	% Compounds
<5 HBond donors	89
<10 HBond acceptors	89
cLogP<5	90
MW<500	80

cLogP vs MW

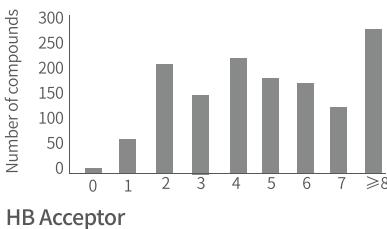


## 类药性参数分析

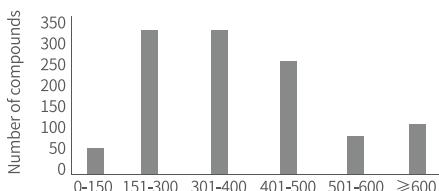
Distribution of HB Donors



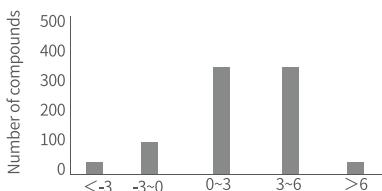
Distribution of HB Acceptors



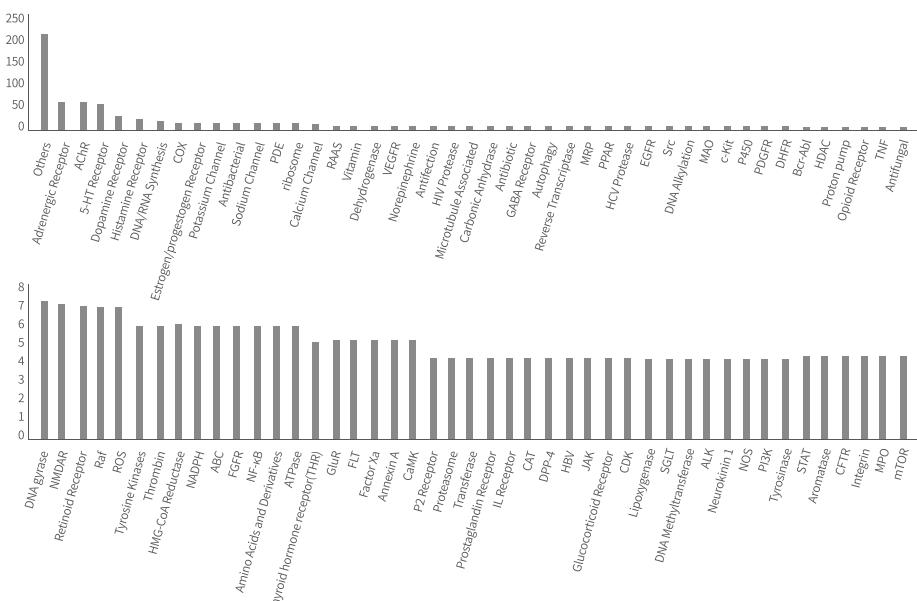
Distribution of Molecular weight

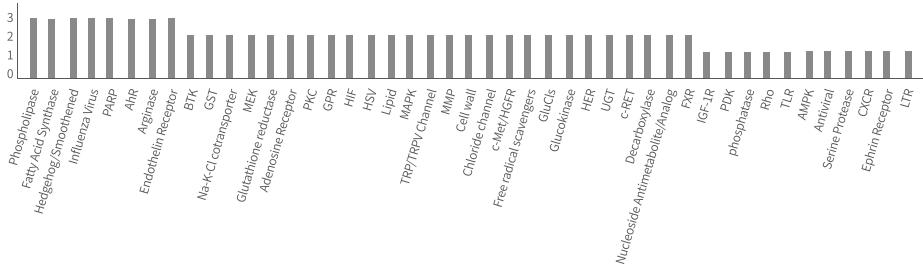


Distribution of cLogP



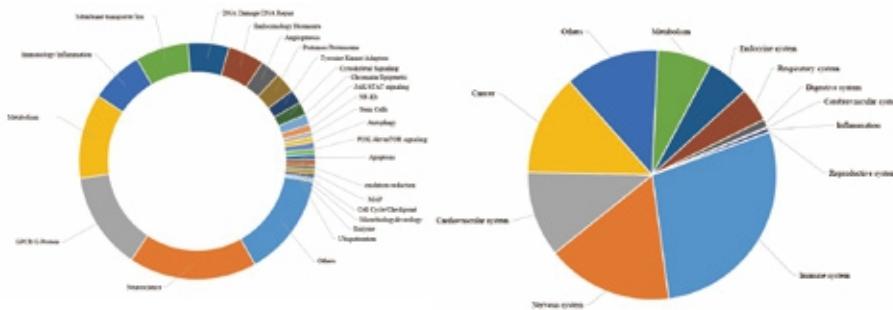
## 靶点组成





## 信号通路组成

## 适应症组成



## 其他相关化合物库推荐

名称	数量	描述
临床药物库 (详见第04页)	1336	库中所有化合物均已被批准进入临床期,按临床一期、二期、三期等进行分类。临床期小分子药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。
经典已知活性库 (详见第52页)	7065	经典已知活性库是7065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。
天然产物库 (详见第71页)	2592	来源清晰:精选来自动物、植物、微生物的已知活性天然产物;更具体到植物种属,并标注准确英文名与拉丁名,方便后期研究确认。结构多样性好:2592种天然产物,包含包括黄酮类、生物碱类在内的30多种化合物类型,拥有详细的分类信息。信息全面:从化合物结构到溶解度,从信号通路、作用靶点到生物活性信息均有详细描述。性价比高:剔除了价格昂贵但成药性差的天然产物,用更少的成本得到更多高品质的天然产物。

# 上市药物库 - 2272 个小分子

Catalog No.L1000

## 产品描述

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，随着对药物安全性和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最有利的线索。

## 产品特性

- 数量丰富** 2272个上市药物化合物集合，是老药新用、细胞诱导分化的有力工具，是整个行业规模领先的上市药物库；
- 覆盖广** 涵盖多个研究领域，包括肿瘤、心血管药物、抗炎/免疫、神经系统药物、呼吸系统药物等；
- 信息详实** 详细的说明书，化合物结构、靶点信息、IC50值、活性描述等；
- 品质保证** NMR、HPLC/LCMS等多种检测技术保证产品结构正确，纯度高，减少假阳性。

## Pack Size

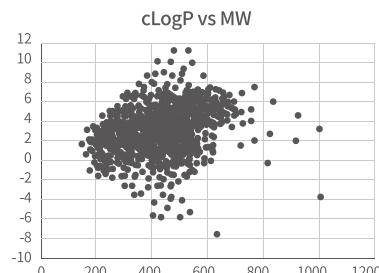
## Price

100 $\mu\text{L}$ * 10 mM (in DMSO)	RMB 102,240.00
250 $\mu\text{L}$ * 10 mM (in DMSO)	RMB 184,030.00
1mg	RMB 184,030.00

## 类药性参数分析

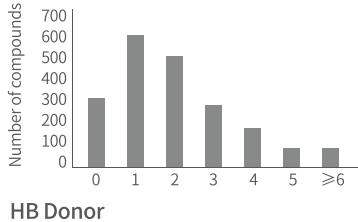
% of compounds compliant with Lipinski's Rules

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

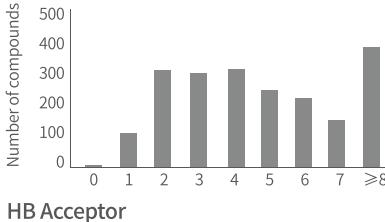


## 类药性参数分析

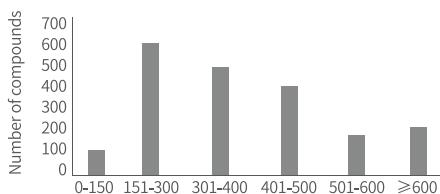
Distribution of HB Donors



Distribution of HB Acceptors

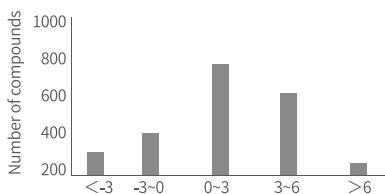


Distribution of Molecular weight



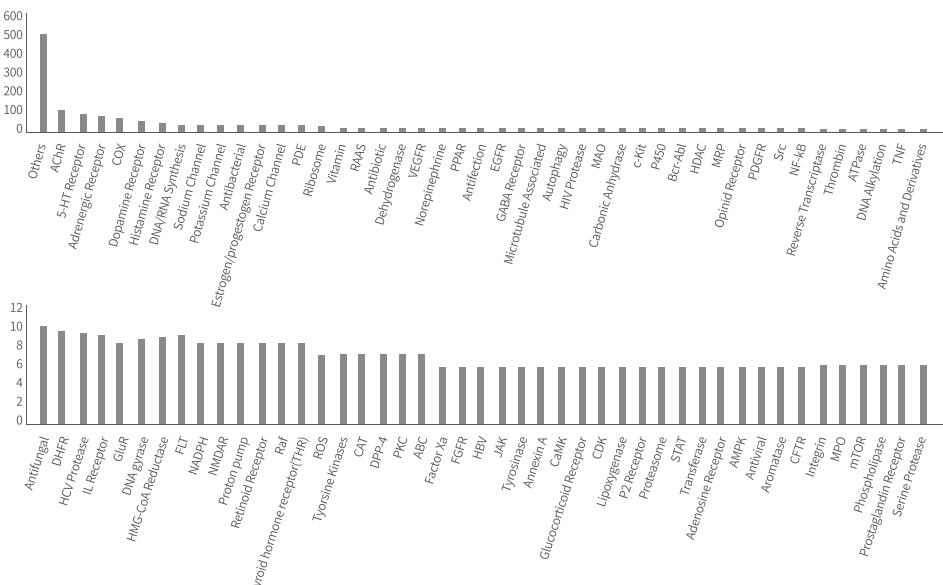
Molecular weight

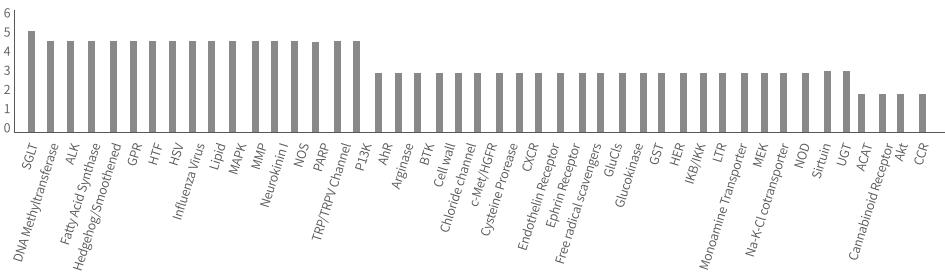
Distribution of cLogP



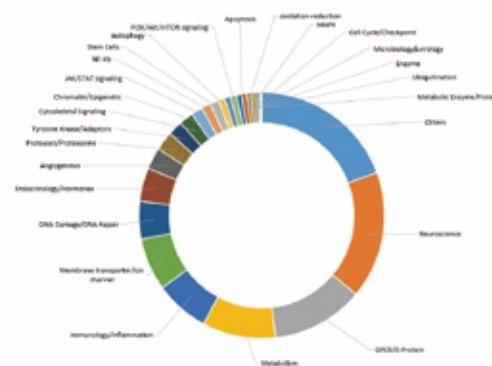
cLogP

## 靶点组成

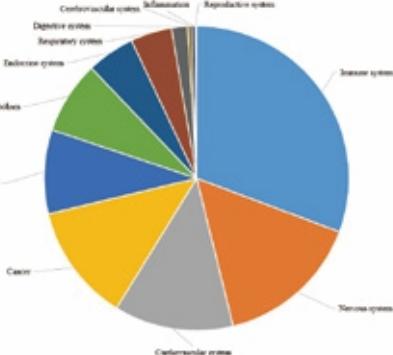




## 信号通路组成



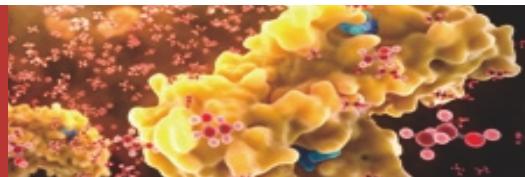
## 适应症组成



## 其他相关化合物库推荐

名称	数量	描述
天然产物库 (详见第71页)	2592	来源清晰：精选来自动物、植物、微生物的已知活性天然产物；更具体到植物种属，并标注准确英文名与拉丁名，方便后期研究确证。结构多样性好：2592种天然产物，含包括黄酮类、生物碱类在内的30多种化合物类型，拥有详细的分类信息。信息全面：从化合物结构到溶解度，从信号通路、作用靶点到生物活性信息均有详细描述。性价比高：剔除了价格昂贵但成药性差的天然产物，用更少的成本得到更多高品质的天然产物。
临床药物库 (详见第04页)	1336	库中所有化合物均已被批准进入临床期，按临床一期、二期、三期等进行分类。临床期小分子药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。
经典已知活性库 (详见第52页)	7065	经典已知活性库是7065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。

# 疾病类型分类



## 抗癌化合物库-3338 个小分子 Catalog No.L2100

### 产品描述

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。

活性化合物库

### 产品特性

- 3338个肿瘤相关的生物活性小分子化合物的特有集合,用于高通量、高内涵筛选;
- 是肿瘤发生机理研究、抗肿瘤药物筛选的有效工具;
- 靶点含PI3K、HDAC、mTOR、CDK、Aurora Kinase、JAK等;
- 结构多样,药效显著,可渗透细胞;
- 详细的说明书,化合物结构、靶点信息、IC50值、活性描述等;
- NMR、HPLC/LCMS检测技术保证产品高纯度和高质量,减少假阳性发生概率。

### Pack Size

### Price

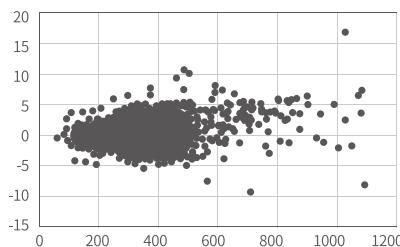
100 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 226,980.00
250 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 393,380.00
1mg	RMB 393,380.00

### 类药性参数分析

#### % of compounds compliant with Lipinski' s Rules

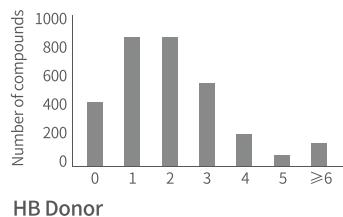
PhysChem Properties	% Compounds
<5 HBond donors	92
<10 HBond acceptors	90
cLogP<5	88
MW<500	81

#### cLogP vs MW

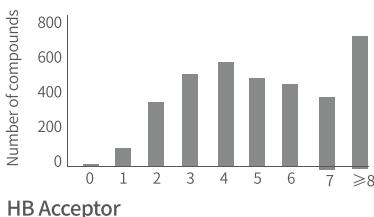


## 类药性参数分析

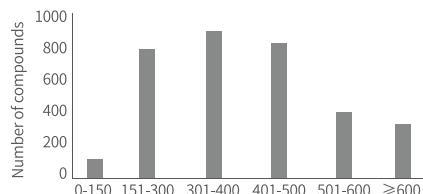
Distribution of HB Donors



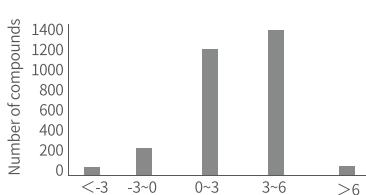
Distribution of HB Acceptors



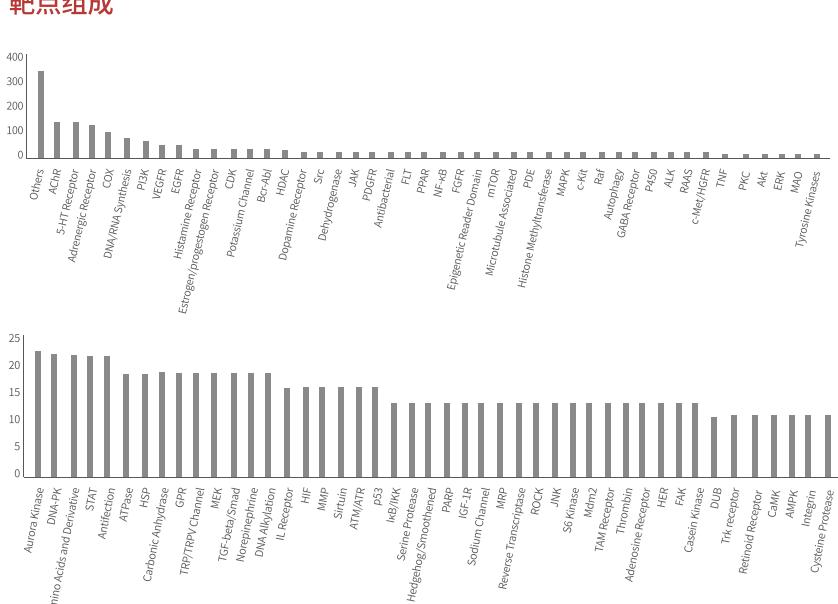
Distribution of Molecular weight

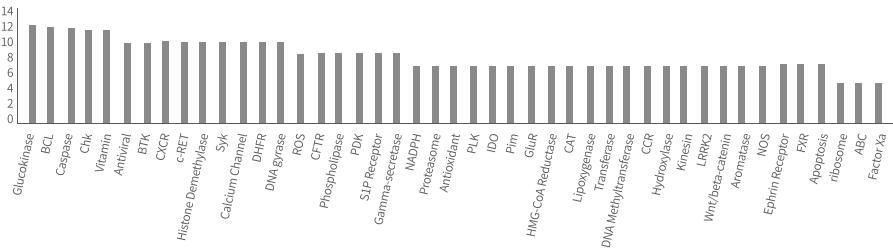


Distribution of cLogP

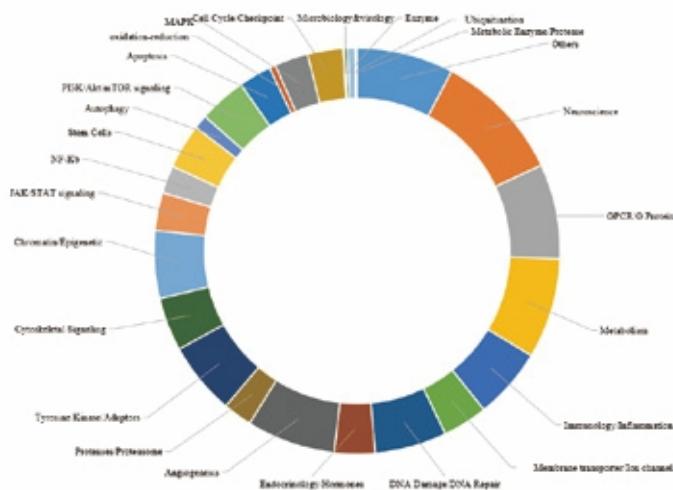


靶点组成





## 信号通路组成



## 七个抗癌相关化合物库简介

名称	数量	特点	优势
抗癌化合物库 (详见第 13 页)	3338	包含抗癌靶点相关的化合物和具有抗癌活性的化合物	最全面的抗癌相关化合物库, 提高实验成功率
抗癌活性化合物库 (详见第 16 页)	1164	从抗癌化合物库中筛选具有抗癌活性的化合物	活性已知, 适合做机理研究和药物功能重定位研究
抗癌药物库 (详见第 16 页)	727	从抗癌活性库中筛选上市和临床期药物	活性已知, 机制明确, 大大缩短研发周期, 优化实验经费
抗癌上市药物库 (详见第 17 页)	330	从抗癌药物库中筛选上市药物	所有化合物均已批准上市, 药效显著, 安全性好, 节省经费
抗癌临床化合物库 (详见第 17 页)	594	从抗癌药物库中筛选临床药物	所有化合物均进入临床阶段, 活性已知, 缩短研发周期, 优化实验经费

# 抗癌活性化合物库 - 1164 个小分子

## Catalog No.L2160

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一大挑战，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；并且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 1164 个具有已知抗癌活性的化合物组成抗癌活性库，可用于具体癌症的阳性对照及癌症机理的研究。希望我们在抗癌研究的路上，助您一臂之力！

Pack Size	Price
100 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 113,490.00
250 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 186,240.00
1mg	RMB 186,240.00

# 抗癌药物库 - 727 个小分子

## Catalog No.L2150

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一大挑战，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；并且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。

我们挑选了 727 种抗癌药物，包括上市和临床期药物，可用于具体癌症的阳性对照及不同癌症之间相关性研究，是您抗癌研究的有力工具！

Pack Size	Price
100 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 99,000.00
250 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 151,200.00
1mg	RMB 151,200.00

# 抗癌上市药物库 - 330 个小分子

## Catalog No.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 330 个已批准上市的抗癌化合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！

Pack Size	Price
100 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 45,350.00
250 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 76,480.00
1mg	RMB 76,480.00

# 抗癌临床化合物库 - 594 个小分子

## Catalog No.L2120

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。

抗癌活性的药物是临床研究的热点之一，根据文献报道和有关公开资料，我们收集了 594 个处于临床试验阶段的抗癌化合物，组成抗癌临床化合物库，可用于癌症相关研究及高通量高内涵筛选。

Pack Size	Price
100 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 82,130.00
250 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 137,500.00
1mg	RMB 137,500.00

# 抗癌细胞代谢库 - 237 个小分子

Catalog No.L2130

肿瘤的代谢异常已成为肿瘤学研究的热点, 细胞代谢的重编程对于癌细胞维持生存和无限增殖至关重要。从德国科学家Warburg最早发现肿瘤细胞存在有氧糖酵解的现象到如今对肿瘤代谢活动的各个方面(糖、脂肪、氨基酸等)的解析和复杂代谢调控网络的发现, 肿瘤代谢的研究进入了更加引人注目的高地。因此, 肿瘤细胞异常的代谢通路(如葡萄糖和谷氨酰胺代谢途径)、关键代谢调控因子(如cMYC、HIF、p53)及代谢酶(如PKM、IDH、GLS)可能是肿瘤治疗的关键靶点。针对肿瘤细胞代谢改变的重要特征及其分子机制, 研制出针对特定代谢通路或特定代谢酶的高效抗肿瘤药物, 从而用于临床治疗一直是肿瘤代谢研究的目标和追求。

我们根据相关文献报道筛选了多种肿瘤代谢相关的生物活性小分子组成抗癌细胞代谢库, 是进行抗肿瘤药物筛选的理想工具。

Pack Size	Price
100 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 33,200.00
250 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 54,860.00
1mg	RMB 54,860.00

# 癌细胞分化化合物库 - 251 个小分子

Catalog No.L2140

癌症已经是全球第二大死亡原因, 无论在发达国家还是在发展中国家, 死亡率和发病率仍不断增高。在癌症中, 分化指肿瘤组织与其来源的正常组织相比, 相似程度大小。分化良好的癌细胞看起来更像正常细胞, 倾向于比低分化或未分化的癌细胞生长和传播的慢。因此分化可用于肿瘤分级系统。

诱导恶性肿瘤细胞分化成熟是恶性肿瘤防治的主要研究方向之一。细胞分化的关键环节是基因调控, 故基因表达时间/空间差异性、差异调控下新合成的特异性蛋白质、不同细胞表面抗原以及异常细胞周期、信号传导通路等成为恶性肿瘤细胞分化机制的主要研究点。除了本库中收录的251个诱导肿瘤细胞分化的小分子外, 您也可以参考我们的抗癌分子库, 抗癌上市药物库, 抗癌临床药物库等。

Pack Size	Price
100 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 33,100.00
250 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 55,220.00
1mg	RMB 55,220.00

# 肿瘤免疫治疗小分子化合物库 - 235 个小分子 New

## Catalog No.L2170

癌症是目前导致人类要死亡的主要原因之一，其传统治疗方法主要是手术、放疗和化疗，但随着医学科学的进步，免疫治疗、靶向治疗、介入、射频等治疗方式不断涌现，为癌症患者提供了新的治疗途径。肿瘤的免疫治疗作为一种创新的治疗方式，已成为肿瘤治疗研究领域的一大热点。因为其卓越的疗效和创新性，在 2013 年被《科学》杂志评为年度最重要的科学突破。

目前，癌症免疫疗法主要有过继细胞疗法、免疫检查点阻断剂、非特异性免疫刺激和癌症疫苗等，大部分都是通过调节 T 细胞受体信号或使用天然的生物分子和相关肿瘤抗原的单克隆抗体刺激免疫系统的识别。而小分子药物相对于生物免疫疗法具有许多的优点：小分子类药物的临床应用历史和发展，使患者更易接受和了解，具有较好的可行性；口服生物利用度；在肿瘤微环境等更大范围的应用可能性等；最显著的优点就是成本低、负担小，而且生产、运输、保存条件和技术要求低，并且患者用药方式方便（口服给药即可）。因此小分子肿瘤免疫治疗药物可以弥补生物免疫疗法的不足，补充现有的治疗方式，与生物免疫疗法联用可产生协同效应，具有巨大的应用潜力。

Pack Size	Price
100 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 31,000.00
250 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 51,700.00
1mg	RMB 51,700.00

# 抗肿瘤库 Plus - 958 个小分子

## Catalog No.L2180

癌症是人类面临的一大挑战，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，为肿瘤提供营养等等。抗肿瘤药物研发作为目前最热门的研究领域，一直受到广大研究人员的关注。而目前药物研发所使用的抗肿瘤活性化合物库，收集的化合物活性研究大都比较成熟，使得研究价值有所下降；使用的未知活性化合物库，其筛选命中率较低，筛选成本较高。

基于上述情况，陶术生物精心挑选了 958 个抗肿瘤相关，结构新颖的活性小分子组成抗肿瘤库 Plus。抗肿瘤库 Plus 覆盖 59 种与肿瘤病理进展相关的靶点，99% 以上的化合物活性值小于 3 μM，是抗肿瘤药物研发、靶向鉴定的有力工具。

Pack Size	Price
100 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 124,540.00
250 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 211,718.00
1mg	RMB 211,718.00

# 抗肺癌化合物库 - 400 个小分子 New

## Catalog No.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<sup>®</sup> 抗肺癌化合物库收集了 400 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。

Pack Size	Price
100 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 54,900.00
250 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 92,700.00
1mg	RMB 92,700.00

# 抗病毒库 - 456 个小分子

## Catalog No.L1700

病毒一直是人类身体健康最大的威胁之一，每年因病毒感染而危及生命的情况数不胜数，如何更有效地抵御病毒的入侵是药物研发的重点之一。

陶术生物抗病毒库收集了 456 种具有抗病毒活性的小分子化合物，靶向流感病毒、HIV、肝炎病毒等多种病毒类型，是抗病毒药物研究的有力工具。

Pack Size	Price
100 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 27,440.00
250 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 45,780.00
1mg	RMB 45,780.00

# 抗感染化合物库 - 605个小分子

## Catalog No.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<sup>®</sup>精选了605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。

Pack Size	Price
100 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 81,359.00
250 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 135,636.00
1mg	RMB 135,636.00

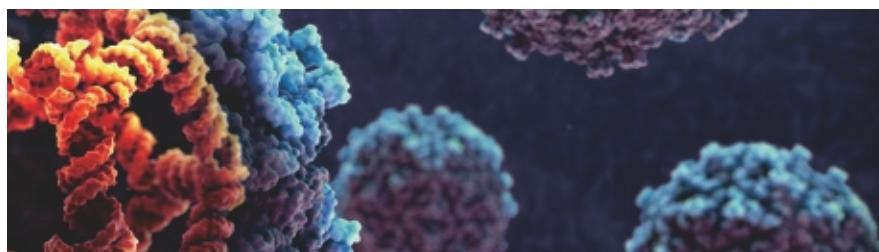
# 抗糖尿病库 - 179个小分子

## Catalog No.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<sup>®</sup>抗糖尿病库包含了179个糖尿病相关活性化合物,是研究糖尿病的优良工具和药物筛选的极佳载体。

Pack Size	Price
100 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 25,243.00
250 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 42,157.00
1mg	RMB 42,157.00



# 抗真菌库 - 66个小分子

Catalog No.L4500

化合物库是药物发现的有效工具，到目前为止，侵袭性真菌感染的治疗选择非常有限，仅包括三类主要药物：多烯类、唑类和棘白菌素类，TargetMol®抗真菌库是66个抗真菌活性化合物的独特集合，包括天然产物、靶点特异性化合物（如多烯、唑类）和FDA批准的抗真菌药物，抗真菌药物的选择仍然关注天然产物，这是因为天然产物抗菌活性都是进化过程中形成的，利用这些产品抗菌治疗是一种朴素又充满智慧的方法。FDA批准的产品更安全有效，这些产品已经通过文献，专利报告和临床研究得到证实，其生物学和药理学活性得到了充分验证。每一个产品我们均提供详细的化学结构、纯度、数量和理化特性等数据。

Pack Size	Price
100 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 9,841.00
250 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 15,762.00
1mg	RMB 15,762.00

# 抗寄生虫库 - 358 个小分子

Catalog No.L4510

寄生虫病分布广泛，世界各地均可见到，尤其是不发达国家和地区发病率较高。如疟疾等疾病严重影响人体健康，更有可能夺走生命，针对寄生虫防治，开展新药研发工作对保护人类健康有着重要意义。

TargetMol®收集了358种具有抗寄生虫活性的新颖小分子，以抗疟原虫活性化合物为主，还包含抗锥虫、血吸虫和隐孢子虫化合物，活性值均在0.9 μM以下，是抗寄生虫药物研发的必备工具。

Pack Size	Price
100 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 46,540.00
250 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 79,118.00
1mg	RMB 79,118.00

# 抗菌活性库 - 909 个小分子

Catalog No.L4520

抗菌药物的出现大大增强了人类抵抗病菌感染的能力，挽救了无数人的生命，使人类寿命至少延长了 10 年，但随着抗菌药物的滥用，耐药致病菌株迅速增加，一旦出现多重耐药的超级病菌，人类将会重回病菌感染肆虐的时代。因此在阻止抗菌药物滥用的同时，迫切需要推动新的抗菌药物研发。

TargetMol<sup>®</sup>充分考虑生物活性和结构新颖性两大关注焦点，收集多种抗生素类化合物，以及结构新颖的抗菌活性化合物，组成抗菌活性库，共 909 种具有抗菌活性的小分子化合物，是抗生素和抗菌药物研发的有效工具。

Pack Size	Price
100 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 118,170.00
250 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 200,889.00
1mg	RMB 200,889.00

# 神经退行性疾病化合物库 - 527 个小分子

New

Catalog No.L2620

神经退行性疾病是机体神经元结构或功能逐渐丧失而引发的一类疾病，包括肌萎缩侧索硬化症 (Amyotrophic lateral sclerosis, ALS)、帕金森病 (Parkinson's disease, PD)、阿尔茨海默病 (Alzheimer disease, AD)、亨廷顿氏病 (Huntington's disease, HD) 以及脊髓性肌萎缩症 (spinal muscular atrophy, SMA) 等，目前这类疾病病因尚不明确并无有效治愈手段，且严重威胁着患者的生活质量。

TargetMol<sup>®</sup>基于目前的研究现状，收集了 527 种与神经退行性疾病相关的化合物，这些化合物或者对神经退行性疾病有一定的疗效，或者作用于神经退行性疾病相关的靶点，可以用于神经退行性疾病相关的药物研发和机制研究。

Pack Size	Price
100 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 72,860.00
250 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 121,990.00
1mg	RMB 121,990.00

# 神经疾病库 - 935 个小分子

Catalog No.L4660

神经系统作为人体最复杂的部分，调控人体的各项生命活动，但人们对神经系统的了解却十分有限。在过去十年中，我们在信号通路研究方面取得了重大突破，这些神经信号通路是神经发生、成瘾、自闭症以及情绪障碍的病理生理学和治疗基础。例如：G 蛋白偶联受体(GPCR)等。

陶术生物神经疾病库包含 935 种与神经系统疾病相关，且结构新颖的小分子化合物，覆盖 52 种神经疾病相关靶点，活性值均小于 3.5 μM，是神经疾病药物筛选及其相关研究的有力工具。

Pack Size	Price
100 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 121,550.00
250 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 206,635.00
1mg	RMB 206,635.00

# 免疫/炎症分子化合物库 - 876个小分子

Catalog No.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-κB 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疾病的药物。

TargetMol® 抗免疫病化合物库包含了 876 个抗炎活性化合物，用于抗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。

Pack Size	Price
100 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 119,164.00
250 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 198,586.00
1mg	RMB 198,586.00

# 抗代谢疾病化合物库 - 1040 个小分子

Catalog No.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<sup>®</sup> 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。

Pack Size	Price
100 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 126,830.00
250 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 197,850.00
1mg	RMB 197,850.00

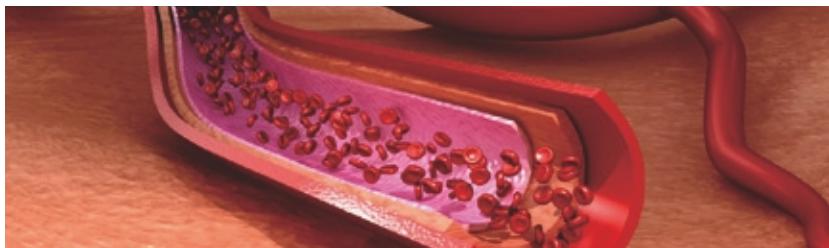
# 抗心血管疾病化合物库 - 515个小分子

Catalog No.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<sup>®</sup> 抗心血管疾病化合物库是由515 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。

Pack Size	Price
100 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 50,114.00
250 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 82,202.00
1mg	RMB 82,202.00



# 抗肥胖化合物库 - 755 个小分子

Catalog No.L7100

近年来肥胖已成为全球最普遍的公共健康问题，肥胖是一种由多种因素(遗传、饮食习惯、生活方式和环境)相互作用引起的复杂的疾病，通常伴随着胰岛素抵抗、氧化应激和炎症标志物表达增加，导致体内脂肪含量增加。肥胖容易引起糖尿病，高血压，动脉硬化等多种代谢紊乱性疾病。肥胖管理的基本策略(如饮食控制、体育运动、手术治疗)分别具有不同程度的局限性和副作用。因此，许多研究人员试图从食物或药物中寻找出抗肥胖的生物活性成分，特别是抑制脂肪等高能量物质吸收过程的化合物、促进脂肪分解的化合物、增加机体代谢能量消耗的化合物，这些化合物包括：脂肪酶抑制剂、 $\alpha$ -葡萄糖苷酶抑制剂、麦芽糖酶抑制剂等。

随着经济发展，肥胖问题已成为全球面临的严峻问题，所以科学家对肥胖的关注和研究更是有增无减。通过对文献和公开资料的整理，我们精心筛选了 755 个抗肥胖化合物组成抗肥胖化合物库，适合于抗肥胖的相关研究。

Pack Size	Price
100 $\mu$ L * 10 mM (in DMSO)	RMB 96,150.00
250 $\mu$ L * 10 mM (in DMSO)	RMB 173,080.00
1mg	RMB 173,080.00

# 血液病分子库 - 126个小分子

Catalog No.L8400

血液病亦称为造血系统疾病，包括原发于造血系统疾病(如白血病原发于骨髓组织等)和主要累及造血系统疾病(如缺铁性贫血)，例如白血病，血友病、再障、地中海贫血、骨髓增生异常综合症(MDS)、多发性骨髓瘤、淋巴瘤等。血液系统疾病多半是难治性疾病，发病隐匿，病状隐匿。由于缺乏特效疗法，许多疾病曾被称为“不治之症”，近年来，随着医学研究的深入发展，血液病的治疗效果有了明显提高。现代医学对血液病的治疗多应用激素、化疗等方法，但副作用大，病人治愈率低、易复发。骨髓移植用于治疗白血病，治愈率有所提高，然而骨髓资源十分缺乏，即使移植成功，5年内复发率也高达70%。因此寻找新的治疗方法和治疗药物具有重要意义。

TargetMol<sup>®</sup>作为全球知名化合物库供应商，积极关注科研动态，为您提供大量造血系统疾病研究相关的优质产品，为您的新药筛选提供一站式服务平台。

Pack Size	Price
100 $\mu$ L * 10 mM (in DMSO)	RMB 12,700.00
250 $\mu$ L * 10 mM (in DMSO)	RMB 19,500.00
1mg	RMB 19,500.00

## 新冠专题



活性化合物库

## 抗 COVID-19 化合物库 - 2448 个小分子 New

Catalog No.L1710

为应对 COVID-19 疫情所造成的全球公共卫生危机，相关部门即出台相应政策支持针对 COVID-19 的快速诊断试剂研发及相关治疗药物研发，包括已上市药物的筛选验证及中成药和天然药物有效成分的筛选验证研究、抗体 / 疫苗类新药研发等。

陶术作为药筛领域的专家，第一时间关注到 8 个抗 SARS-CoV-2 相关蛋白靶点（RBD、ACE2、Mpro（又名 3CLpro）、PLpro、nsp16、X 结构域、RdRp（又名 nsp12）、nsp15）的结构信息后，就投入到高效的抗 COVID-19 病毒靶标虚拟筛选工作中，选用 TargetMol® 库（7729 个）和 Bioactive Compound Library（7647 个）2 个库共 15376 个化合物进行虚拟筛选。基于上述虚拟筛选的结果，Targetmol® 收录了超过 2000 种具有抗 COVID-19 CADD 活性的化合物，希望我们的工作可以为成功开发抗 COVID-19 药物并最终攻克疫情助一臂之力！

Pack Size	Price
100 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 195,840.00

## 抗 COVID-19 CADD 活性库 - 362 个小分子 New

Catalog No.L1711

COVID-19 病毒蛋白大部分与对应的 SARS 蛋白类似（序列相似性 >=60%），青岛海洋科学与技术试点国家实验室的科研团队采用 Swiss-Model 同源模建方法成功构建了 COVID-19 病毒的 Spike 蛋白的 RBD、ACE2、Mpro（又名 3CLpro）、PLpro、nsp16、X 结构域、RdRp（又名 nsp12）、nsp15 共 8 个蛋白或者结构域的三维结构。这些蛋白结构的模建为靶向 COVID-19 病毒关键蛋白进行虚拟筛选提供了有用信息，而基于分子对接的虚拟筛选工作有望快速筛选出高亲和力的靶向小分子药物，最终可为抗 COVID-19 病毒药物筛选的分子和细胞水平生物实测验证提供更多候选化合物。

为提高虚拟筛选效率和可靠性，我们采用三轮筛选策略，即由两轮基于分子对接的虚拟筛选加一轮人工筛查，最终人工筛查得到 362 个化合物，这些化合物或者已在文献中广泛报道其潜在的抗肿瘤，抗菌，抗炎，抗氧化等活性，或者也有可能文献揭露了这些化合物的潜在的作用靶点，而如果可以经活性证实这些化合物中也存在抗 COVID-19 病毒活性，相当于是“老药新用”或“天然产物新靶点”的确认等新颖工作思路。希望我们的工作可以为成功开发抗 COVID-19 病毒药物并最终攻克疫情助一臂之力！

Pack Size	Price
100 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 50,890.00

## 3CLpro 靶向化合物库 (CADD) - 161 个小分子 New

### Catalog No.L1712

Mpro 蛋白 (也叫 3CLpro 蛋白), 是一种半胱氨酸蛋白酶, 常被用来设计共价抑制剂。在过去, SARS 的 Mpro 的研究较多, 抑制剂也比较丰富, 研究较为成熟, 因此该靶点也被选为热门靶点, 已有的蛋白酶抑制剂上市药物也发现对该靶点具有抑制作用。针对 3CLpro 靶点, 经过基于分子对接的虚拟筛选, 我们选出了评分排名 top161 的化合物组成 3CLpro 靶向化合物库, 是筛选抗新型冠状病毒药物的有力工具。希望我们的工作可以为成功开发抗 COVID-19 病毒药物并最终攻克疫情助一臂之力!

Pack Size	Price
100 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 22,680.00

## ACE2 靶向化合物库 (CADD) - 462 个小分子 New

### Catalog No.L1713

ACE2 与冠状病毒 S 蛋白 (spike) 的 RBD (receptor binding domain) 直接相互作用, 但在相互作用界面, ACE2 并不具备一个成药口袋的区域, 研究人员经过分析发现, 在有小分子结合 ACE2 的情况下, 结合 RBD 的 ACE2 的区域发生偏移, 因此通过结合 ACE2 来干扰 RBD 的结合也成为了一种可能。针对 ACE2 靶点, 经过基于分子对接的虚拟筛选, 我们选出了评分排名 top462 的化合物组成 ACE2 靶向化合物库, 是筛选抗新型冠状病毒药物的有力工具。希望我们的工作可以为成功开发抗 COVID-19 病毒药物并最终攻克疫情助一臂之力!

Pack Size	Price
100 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 56,160.00

## RBD 靶向化合物库 (CADD) - 206 个小分子 New

### Catalog No.L1714

ACE2 (血管紧张素转化酶 2) 与冠状病毒 S 蛋白 (spike) 的 RBD (receptor binding domain) 直接相互作用, 因此, 直接靶向 Spike 蛋白的 RBD 与 ACE2 的相互作用成为阻断 2019-nCoV 感染的一个重要途径。针对 RBD 靶点, 经过基于分子对接的虚拟筛选, 我们选出了评分排名 top206 的化合物组成 RBD 靶向化合物库, 是筛选抗新型冠状病毒药物的有力工具。希望我们的工作可以为成功开发抗 COVID-19 病毒药物并最终攻克疫情助一臂之力!

Pack Size	Price
100 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 28,980.00

# nsp15 靶向化合物库(CADD) - 470 个小分子 New

## Catalog No.L1719

2020年3月2日,来自芝加哥大学等机构的研究人员合作,在预印本网站BioRxiv 发表论文:Crystal structure of Nsp15 endoribonuclease NendoU from SARS-CoV-2。该研究解析了新冠病毒中一个可作为药物研究靶向蛋白质nsp15的晶体结构。研究结果显示, SARS-CoV-2的 nsp15 蛋白与SARS病毒中蛋白质的结构相似程度高达89%。2010年发表的有关SARS 病毒的研究表明,抑制nsp15可以减慢病毒复制。这表明,针对nsp15的药物或可以开发为对抗COVID-19的有效药物。

基于分子对接的虚拟筛选工作有望快速筛选出高亲和力的靶向小分子药物,最终可为抗COVID-19病毒药物筛选的分子和细胞水平生物实测验证提供更多候选化合物。陶陶生物的药物虚拟筛选团队在第一时间关注到nsp15蛋白的结构信息后,就投入到高效的抗COVID-19病毒靶标虚拟筛选工作中。研究团队采用药物设计平台Sybyl-X2.0的Surflex分子对接技术,选用TargetMol®库(7729个)和Bioactive Compound Library (7647个)2个库共15376个化合物进行虚拟筛选。针对nsp15靶点,经过基于分子对接的虚拟筛选,我们选出了评分排名top 470的化合物组成 nsp15 靶向化合物库,是筛选抗新型冠状病毒药物的有力工具。希望我们的工作可以为成功开发抗COVID-19病毒药物并最终攻克疫情助一臂之力!

Pack Size	Price
100 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 57,100.00

# nsp16 靶向化合物库 (CADD) - 281 个小分子 New

## Catalog No.L1715

nsp16 是病毒编码的一个甲基转移酶,为病毒 RNA 添加“帽子”,维持病毒 RNA 稳定性,兼具底物 SAM 结合,其活性口袋具有一定的药物开发潜力。针对 nsp16 靶点,经过基于分子对接的虚拟筛选,我们选出了评分排名top 281 的化合物组成 nsp16 靶向化合物库,是筛选抗新型冠状病毒药物的有力工具。希望我们的工作可以为成功开发抗 COVID-19 病毒药物并最终攻克疫情助一臂之力!

如果您对 COVID-19 的相关靶点 nsp16 感兴趣,我们可以免费向您提供这些基于 nsp16 靶点蛋白的计算机虚拟筛选结果,以共同加速抑制新型冠状病毒的新药研发速度,欢迎与我们联系。

Pack Size	Price
100 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 40,040.00

## PLpro 靶向化合物库 (CADD) - 474 个小分子 New

### Catalog No.L1716

PLpro 蛋白是半胱氨酸蛋白酶，类似木瓜蛋白酶，与半胱氨酸类的去泛素化酶也较为相似，在病毒基因组复制及逃避宿主天然免疫中发挥重要作用，是研发抗病毒药物的重要靶标。针对 PLpro 靶点，经过基于分子对接的虚拟筛选，我们选出了评分排名 top474 的化合物组成 PLpro 靶向化合物库，是筛选抗新型冠状病毒药物的有力工具。希望我们的工作可以为成功开发抗 COVID-19 病毒药物并最终攻克疫情助一臂之力！

Pack Size	Price
100 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 57,360.00

## RdRP 靶向化合物库 (CADD) - 464 个小分子 New

### Catalog No.L1717

RdRP即RNA依赖的RNA聚合酶，除逆转录病毒外，几乎所有的正链RNA病毒都编码RNA依赖的RNA聚合酶 (RdRP)。针对COVID-19有效的化合物Remdesivir是一种核苷酸类似物前药，其作用靶点就是COVID-19的RdRP。因此，RdRP也是抗COVID-19的重要靶点。针对RdRP靶点，经过基于分子对接的虚拟筛选，我们选出了评分排名top464的化合物组成RdRP靶向化合物库，是筛选抗新型冠状病毒药物的有力工具。希望我们的工作可以为成功开发抗COVID-19病毒药物并最终攻克疫情助一臂之力！

Pack Size	Price
100 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 56,280.00

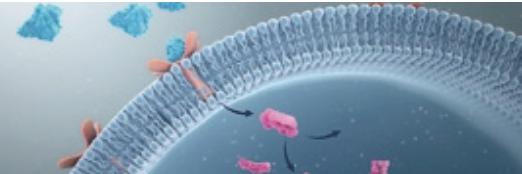
## X 结构域靶向化合物库 (CADD) - 463 个小分子 New

### Catalog No.L1718

X 结构域是 pp1a 中的保守结构，pp1a 蛋白被病毒蛋白酶切割后，X 结构域属于 nsp3。根据结构推测具有腺苷二磷酸核糖 1' 磷酸酶活性，也有报道该结构干扰天然免疫，因此对 COVID-19 具有重要功能，该结构结合有一个 ADP-ribose，其口袋具有一定药物开发潜力，因此也可以用于药物筛选或者设计。针对 X 结构域靶点，经过基于分子对接的虚拟筛选，我们选出了评分排名 top463 的化合物组成 X 结构域靶向化合物库，是筛选抗新型冠状病毒药物的有力工具。希望我们的工作可以为成功开发抗 COVID-19 病毒药物并最终攻克疫情助一臂之力！

Pack Size	Price
100 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 56,280.00

# 通路靶点分类



## 蛋白酶抑制剂库 - 162个小分子

Catalog No.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162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。

Pack Size	Price
100 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 27,886.00
250 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 46,489.00
1mg	RMB 46,489.00

## 表观遗传库 - 903 个小分子

Catalog No.L1200

### 产品描述

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质重塑；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。表征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征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。

陶术生物表观遗传库收集 903 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。

## 产品特性

- 903个具有表观遗传学生物活性的小分子化合物的独特集合；
- 包含表观遗传相关靶点(DNA 甲基转移酶、组蛋白去乙酰化酶(HDACs)、SIRTs、赖氨酸去甲基化酶、组蛋白乙酰转移酶(HATs)、MicroRNA 等)的抑制剂和激活剂；
- 其中一些活性化合物已得到FDA批准上市；
- 结构多样，药效显著，细胞渗透性良好；
- 详细的说明书，化合物结构、靶点信息、IC50值、活性描述等；
- NMR和HPLC检测技术保证产品高纯度和高质量；
- 所有化合物现货供应。

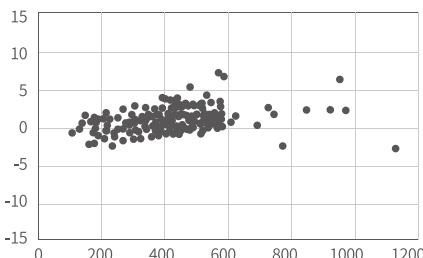
Pack Size	Price
100 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 115,000.00
250 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 207,010.00
1mg	RMB 207,010.00

## 类药性参数分析

### % of compounds compliant with Lipinski's Rules

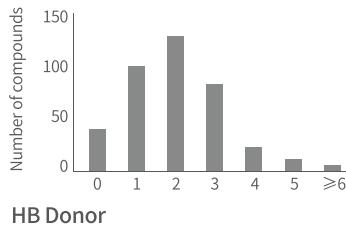
PhysChem Properties	% Compounds
<5 HBond donors	95
<10 HBond acceptors	94
cLogP<5	92
MW<500	82

cLogP vs MW

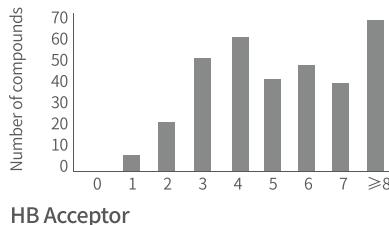


## 类药性参数分析

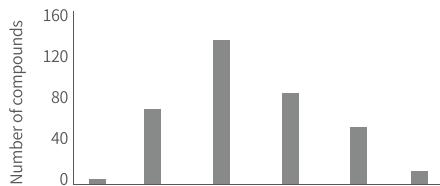
Distribution of HB Donors



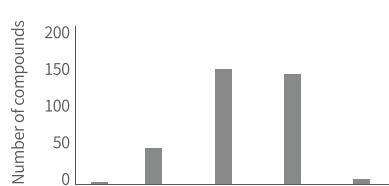
Distribution of HB Acceptors



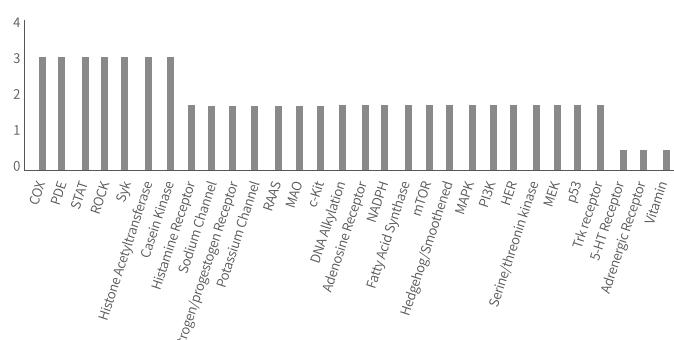
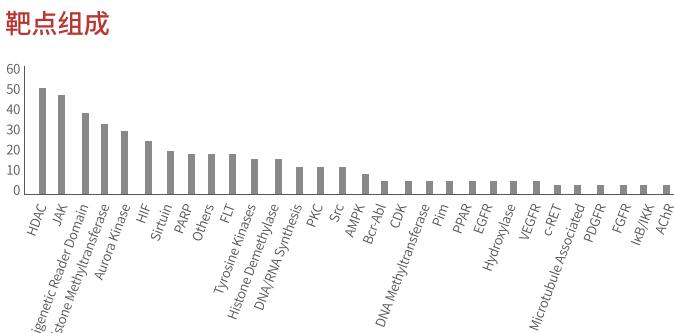
Distribution of Molecular weight



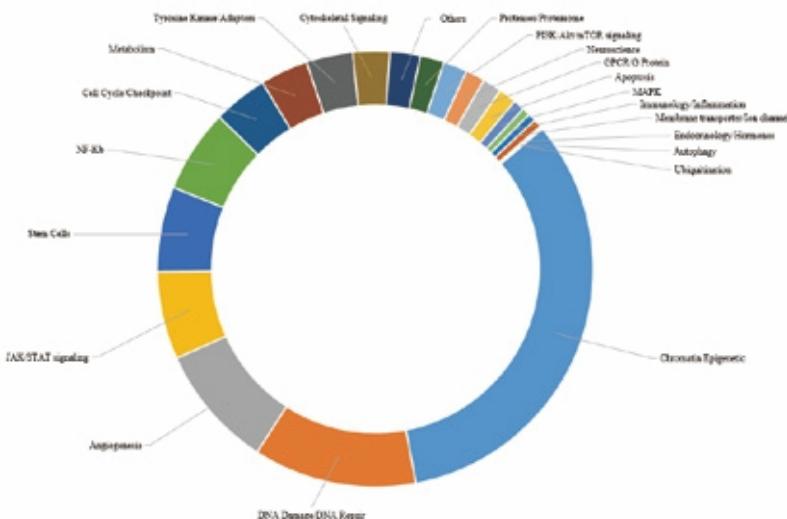
Distribution of cLogP



靶点组成



## 信号通路组成



## 其他相关化合物库推荐

名称	数量	描述
上市药物库 (详见第10页)	2272	上市药物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，是老药新用、新的药物靶点筛选的有效工具；由于活性明确，靶点已知，也可以用于细胞诱导分化。
经典已知活性库 (详见第52页)	7065	经典已知活性库是7065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。
天然产物库 (详见第71页)	2592	来源清晰：精选来自动物、植物、微生物的已知活性天然产物；更具体到植物种属，并标注准确英文名与拉丁名，方便后期研究验证。结构多样性好：2592种天然产物，包含包括黄酮类、生物碱类在内的30多种化合物类型，拥有详细的分类信息。信息全面：从化合物结构到溶解度，从信号通路、作用靶点到生物活性信息均有详细描述。性价比高：剔除了价格昂贵但成药性差的天然产物，用更少的成本得到更多高品质的天然产物。

# 抑制剂库 - 3809 个小分子

## Catalog No.L2000

细胞信号控制细胞基本活动，调控细胞行为。细胞感知并准确响应微环境的变化是发育、组织修复和免疫的基础，也是正常组织稳态的基础。细胞信号间相互作用异常或细胞信息处理错误是导致癌症、自身免疫和糖尿病等疾病的原因。深入了解细胞信号传导，疾病可得到更有效的治疗。

TargetMol<sup>®</sup> 抑制剂库是由 3809 个靶向小分子化合物组成的集合，每一个化合物都有明确的抑制靶点，靶点所处的信号通路也因此被阻断，TargetMol<sup>®</sup> 抑制剂库是研究信号通路及相关疾病的有力工具，可用于高通量筛选和高内涵筛选。

Pack Size	Price
100 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 259,000.00
250 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 449,000.00
1mg	RMB 449,000.00

# PI3K/Akt/mTOR 化合物库 - 200 个小分子

## Catalog No.L1300

PI3K / AKT / mTOR 信号传导通路是调节细胞周期非常重要的一条通路，在细胞生长、存活、增殖、凋亡、血管生成、自吞噬等过程中发挥着极其重要的生物学功能。该通路由 PI3 激酶 (PI3K)、蛋白激酶 B (Akt) 和哺乳动物类雷帕霉素靶蛋白 (mTor) 三个作用分子组成，PI3K 活化后，通过 PIP3 的作用，磷酸化并激活 Akt，Akt 可以有许多下游效应，如激活 CREB，抑制 p27，在细胞质中定位 FOXO，激活 PtdIns-3ps。mTOR 已经被确定是 PI3K/Akt 下游一个重要靶点，是自噬调节中研究最多的靶蛋白之一，是调控肿瘤细胞自噬最经典的通路。因此该通路被广泛地研究并开发新的抗肿瘤制剂，mTOR 的抑制剂对于多种肿瘤的治疗已取得了很好的研究结果。

PI3K/Akt/mTOR 化合物库是 200 个与 PI3K/Akt/mTOR 信号通路相关的小分子化合物的独特集合，可用于高通量、高内涵筛选；

Pack Size	Price
100 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 44,622.00
250 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 70,300.00
1mg	RMB 70,300.00

# MAPK 抑制剂库 - 140个小分子

## Catalog No.L1400

MAPK 是信号从细胞表面传导到细胞核内部的重要传递者。丝裂原活化蛋白激酶 (MAPK) 是一组能被不同的细胞外刺激活化的蛋白激酶，如细胞因子、神经递质、激素、细胞应激及细胞黏附等。所有的真核细胞都能表达 MAPK，MAPK 通路的基本组成是一种从酵母到人类都保守的三级激酶模式，包括 MAPK 激酶激酶 (MKKK)、MAPK 激酶 (MKK) 和 MAPK，这三种激酶能依次激活，MAPK 链是真核生物信号传递网络中的重要途径之一，在基因表达调控和细胞质功能活动中发挥关键作用。共同调节着细胞的生长、分化、对环境的应激适应、炎症反应等多种重要的细胞生理和病理过程。

TargetMol<sup>®</sup> MAPK 抑制剂库是有 140 个 MAPK 信号通路相关的小分子的集合，用于研究 MAPK 信号通路及相关疾病药物筛选。

Pack Size	Price
100 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 19,203.00
250 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 31,992.00
1mg	RMB 31,992.00

# GPCR 靶点分子库 - 940 个小分子

## Catalog No.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<sup>®</sup> GPCR 靶向化合物库是由 940 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 相关科学的研究和药物筛选，可用于高通量、高内涵筛选。

Pack Size	Price
100 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 75,250.00
250 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 123,570.00
1mg	RMB 123,570.00

# GPCR 库 Plus - 403 个小分子

## Catalog No.L1580

G 蛋白偶联受体 (GPCR) 超家族是对真核细胞信号传导至关重要的多跨膜蛋白。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，另外还有多种“孤儿”GPCR(未发现配体)也是药物研发的焦点。GPCR 靶向药物研究具有极大的应用价值，寻找对 GPCR 具有高亲和力和特异性的化合物是 GPCR 靶向药物研发的必要前提。

陶术生物收集了 403 种 GPCR 靶向的生物活性化合物组成 GPCR 库 Plus，生物活性值均小于  $3.5\mu\text{M}$ 。GPCR 库 Plus 不仅可用于 GPCR 相关的药物研发，也可以作为靶点鉴定和信号通路研究的工具化合物库。

Pack Size	Price
100 $\mu\text{L}$ * 10 mM (in DMSO)	RMB 52,390.00
250 $\mu\text{L}$ * 10 mM (in DMSO)	RMB 89,063.00
1mg	RMB 89,063.00

# 核受体化合物库 - 239 个小分子

## Catalog No.L1510

核受体是细胞内一类区别于膜受体的蛋白，它们与相应配体结合后，能够直接与基因组 DNA 结合并调节相邻基因表达，因此这类受体被归类为转录因子。核受体在胚胎发育和机体内环境平衡中发挥关键作用。近年来，核受体家族在代谢性疾病领域受到广泛的关注，已有研究证明，它们与糖尿病、脂肪肝等疾病的的发生发展密切相关，也被称为代谢性核受体。

TargetMol® 汇集了 239 种有文献报道的核受体相关化合物，适用于核受体相关信号通路及疾病研究，可用于高通量筛选和高内涵筛选。

Pack Size	Price
100 $\mu\text{L}$ * 10 mM (in DMSO)	RMB 31,500.00
250 $\mu\text{L}$ * 10 mM (in DMSO)	RMB 52,580.00
1mg	RMB 52,580.00

# 激酶抑制剂库 - 1250 个小分子

## Catalog No.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。最大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<sup>®</sup> 激酶抑制剂库含有1250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。

Pack Size	Price
100 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 138,800.00
250 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 231,560.00
1mg	RMB 231,560.00

# 酪氨酸激酶分子库 - 339个小分子

## Catalog No.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)可能是癌症治疗最有吸引力的靶点，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<sup>®</sup> 酪氨酸激酶分子库精选339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。

Pack Size	Price
100 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 65,535.00
250 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 93,445.00
1mg	RMB 93,445.00

# 神经信号分子库 - 936 个小分子

Catalog No.L2600

神经元之间和神经元内部的通信对于神经系统的所有功能至关重要，无论是从发育到衰老，还是从健康到疾病。在过去十年中，我们对神经系统内分子、细胞和系统信号通路的认识取得了巨大进步，在信号通路研究方面取得了重大突破，这些神经信号通路是神经发生、成瘾、自闭症以及情绪障碍的病理生理学和治疗基础。例如：G 蛋白偶联受体(GPCR)，包括 5-HT 受体、组胺受体、阿片受体等，是最大类的神经元信号传导途径，GPCR 功能障碍会引起多种神经疾病；Notch 信号途径调节神经干细胞增殖、存活、自我更新和分化，Notch 信号传导异常参与中风、阿尔茨海默病和 CNS 肿瘤等疾病中发生的病理过程。因此靶向神经元信号传导，可以用来治疗多种不同 CNS 疾病。

TargetMol® 神经信号分子库包含 936 种与中枢神经系统信号传导有关的小分子化合物，主要用于神经系统类疾病的药物研发，可用于高通量、高内涵筛选。

Pack Size	Price
100 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 73,320.00
250 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 121,680.00
1mg	RMB 121,680.00

# 神经递质受体化合物库 - 400 个小分子

Catalog No.L2610

神经递质是人类行为的化学基础。研究证实行为病理大都由一个或数个神经递质缺失或增多失平衡引起。躯体疾病也可由于特殊的神经径路障碍引起，例如帕金森病(PD)。脑内神经递质分为生物原胺类、氨基酸类、肽类、乙酰胆碱类等。生物原胺类神经递质是最先发现的一类，包括：多巴胺(DA)、去甲肾上腺素(NE)、肾上腺素(E)、5-羟色胺(5-HT)也称(血清素)。氨基酸类神经递质包括： $\gamma$ -氨基丁酸(GABA)、甘氨酸、谷氨酸、组胺。肽类神经递质分为：内源性阿片肽、P 物质、神经加压素、胆囊收缩素(CCK)、生长抑素、血管加压素和缩宫素、神经肽 Y。其它神经递质还有：核苷酸类、花生酸碱、阿南德酰胺、sigma 受体( $\sigma$ 受体)。在突触后膜或效应器细胞膜上有能与神经递质相结合的特殊蛋白质，称神经递质受体或突触后受体。许多精神药物作用于神经递质受体。

TargetMol® 收集了 400 种神经递质受体相关的化合物，可用于神经系统药物的开发。

Pack Size	Price
100 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 58,000.00
250 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 86,200.00
1mg	RMB 86,200.00

# 肾上腺素能受体化合物库 - 117个小分子

## Catalog No.L2700

肾上腺素能受体是一种 G 蛋白偶联受体，在多种组织细胞膜表达，调控心血管、气管、胃肠道等处的平滑肌活动。TargetMol® 肾上腺素能受体库含 117 种活性化合物，包括内源性神经递质、激动剂、拮抗剂和上市药物。该分子库是筛选或鉴定重组孤儿 G 蛋白偶联受体、靶标验证、二次筛选和其他药理学应用的理想选择。

Pack Size	Price
100 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 15,912.00
250 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 26,564.00
1mg	RMB 26,564.00

# 5-羟色胺分子库 - 134个小分子

## Catalog No.L2800

5-羟色胺最早是从血清中发现的，又名血清素，是衍生自色氨酸的单胺神经递质。广泛存在于哺乳动物组织中，主要位于CNS和胃肠道，调节神经传递、胃肠动力、疼痛感知、止血、饥饿和心血管功能。血清素受体是在中枢和周围神经系统中发现的一组G蛋白偶联受体(GPCR)和配体门控离子通道(LGIC)，可分为七个亚科，至少有十四种受体亚型已被发现，它们同时介导“兴奋性”和“抑制性”神经传递，影响各种生物学和神经学过程，因此血清素受体是多种药物的靶标，包括许多抗抑郁药、抗精神病药、减食欲药、止吐药、胃动力药和抗偏头痛药。

TargetMol® 5-羟色胺分子库包含134个靶向血清素的小分子化合物，主要用于神经系统类疾病的药物研发，可用于高通量、高内涵筛选。

Pack Size	Price
100 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 17,693.00
250 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 29,480.00
1mg	RMB 29,480.00

# 自噬库 - 623个小分子

Catalog No.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分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，参与生物的发育、生长等多种过程，细胞自噬的异常导致癌细胞的出现。

TargetMol<sup>®</sup>自噬库集合了文献报道的623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。

Pack Size	Price
100 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 148,562.00
250 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 220,812.00
1mg	RMB 220,812.00

# 组胺&褪黑色素化合物库 - 99个小分子

Catalog No.L3300

组胺是由酶催化组氨酸脱羧生成的一种重要生物活性介质。组胺存在于肥大细胞内，亦存在于肺、肝及胃的粘膜组织内，它在过敏与炎症的调节上扮演重要角色。在中枢神经系统，组胺能神经元胞体局限于下丘脑，而其纤维投射却相当广泛，支配包括脊髓在内的几乎所有脑区，参与睡眠、情感、食欲控制、体温调节、学习与记忆形成等功能。目前组胺的4种受体均得到克隆与鉴定，其中，H1R-H3R在脑内大量表达，而H4R主要在周围组织中被发现。组胺能神经系统紊乱与多种脑疾病与精神疾病密切相关。褪黑素(melatonin)是由哺乳动物和人类的松果体产生的一种胺类激素，通过内分泌系统的调节而起作用。国内外对褪黑激素的生物学功能进行了广泛的研究，表明其具有促进睡眠、调节时差、抗衰老、调节免疫、抗肿瘤等多项生理功能。

TargetMol<sup>®</sup>作为全球知名化合物库供应商，积极关注科研动态，为您提供多种组胺受体和褪黑素受体相关的优质产品，助力您的相关机理与疾病研究。

Pack Size	Price
100 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 14,473.00
250 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 24,114.00
1mg	RMB 24,114.00

# 细胞因子抑制剂库 - 182个小分子

## Catalog No.L3600

细胞因子是与维持免疫平衡相关的小分泌蛋白，与多种自身免疫和炎性疾病的发生机理有关。阻断细胞因子或其受体的生物制剂已经显著改善了这些病症的治疗方法，尽管如此，仍有一些患者对这些药物没有反应或者没有达到理想效果。

细胞因子通常与膜特异受体结合，激活相关信号途径，调控基因表达和细胞功能，例如白细胞介素，干扰素（IFN）和肿瘤坏死因子（TNF）等。转导细胞因子信号的常见途径有：JAK-STAT、NF-κB、MAPK、PI3K等，随着研究的深入针对上述途径的小分子抑制剂越来越多，有些已经批准上市，我们精选了182个细胞因子相关化合物组成TargetMol® 细胞因子抑制剂库，其靶点涉及多种不同功能的细胞因子，适用于高通量、高内涵筛选。

Pack Size	Price
100 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 39,310.00
250 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 58,600.00
1mg	RMB 58,600.00

# JAK-STAT 化合物库 - 145个小分子

## Catalog No.L3700

细胞信号传导通路是细胞内蛋白质之间相互作用的级联反应，将信号逐级传递并放大。JAK-STAT 信号传导途径将细胞外的化学信号传递到细胞核，通过调节转录过程调控相关基因表达。该途径有三个关键部分：受体（结合细胞外化学信号）、JAKs（Janus 激酶）和 STATs（信号转导因子和转录蛋白激活因子）。JAK-STAT 信号传导途径参与调控免疫、细胞分裂、细胞死亡和肿瘤形成等多种生物过程，因此该信号传导途径的异常可能导致多种疾病，如皮肤病，癌症和免疫系统的疾病等。研究表明 JAKs 激酶有四种亚型（JAK1、JAK2、JAK3 和 TYK2），STAT 有 7 种亚型（STAT1、STAT2、STAT3、STAT4、STAT5A、STAT5B 和 STAT6）。

TargetMol® JAK-STAT 化合物库是 145 个 JAK/STAT 靶点相关的小分子化合物的独特集合，用于 JAK/STAT 靶点相关的研究以及药物的筛选，可用于高通量、高内涵筛选。

Pack Size	Price
100 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 19,865.00
250 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 33,205.00
1mg	RMB 33,205.00

# NF-κB 通路分子库 - 173个小分子

## Catalog No.L3800

NF-κB为一个转录因子蛋白家族,包括5个亚单位,两个亚单位形成的同源或异源二聚体与靶基因上特定的序列结合调节基因转录,不同的NF-κB二聚体在选择结合序列时可能略有差异,这是NF-κB通过不同的二聚体形式对不同基因的表达进行精细调节的一种方式。在静息的细胞中,NF-κB和IκB形成复合体,以无活性形式存在于胞浆中。当细胞受细胞外信号刺激后,IκB激酶(IκB kinase, IKK)将IκB磷酸化,使NF-κB暴露核定位位点。游离的NF-κB迅速移位到细胞核,与特异性序列结合,诱导相关基因转录。参与免疫反应的早期和炎症反应各阶段的许多分子都受NF-κB的调控,包括:TNF-α、IL-1β、IL-2、IL-6、IL-8、IL-12、趋化因子、粘附分子、集落刺激因子等。此外,与细胞凋亡有关的分子如:肿瘤坏死因子受体相关因子-1(TRAF-1),抗细胞凋亡的蛋白-1和-2(IAP1/ IAP2),TNF受体相关因子(TRAF)也都受NF-κB的调控。

TargetMol® NF-κB信号通路分子库是由173 个NF-κB信号通路相关的小分子化合物组成独特集合,用于NF-κB信号通路相关的研究及药物的筛选,可用于高通量、高内涵筛选。

Pack Size	Price
100 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 27,680.00
250 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 43,250.00
1mg	RMB 43,250.00

# DNA 损伤和修复分子库 - 475个小分子

## Catalog No.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 475 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。

Pack Size	Price
100 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 68,907.00
250 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 102,364.00
1mg	RMB 102,364.00

# DNA 损伤 / 修复库 Plus - 667 个小分子

## Catalog No.L3980

DNA 损伤和修复是细胞反复运行的进程，可使细胞基因组免于损伤和突变，对细胞存活至关重要。人体的各类代谢活动以及环境因素都可能产生 DNA 损伤，而修复一旦不及时，细胞则会出现衰老、凋亡或癌变的情况。另一方面癌细胞具有很高的 DNA 损伤修复活性，使癌细胞对多种化疗药物出现耐药性。因此展开 DNA 损伤 / 修复相关研究对人体健康具有重要意义。

陶素生化 DNA 损伤 / 修复库收集 667 种与 DNA 损伤和修复相关的活性小分子，覆盖 19 种不同的 DNA 损伤 / 修复靶点，活性值均小于 3 μM。是 DNA 损伤 / 修复相关研究的有力工具。

Pack Size	Price
100 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 86,710.00
250 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 147,398.00
1mg	RMB 147,398.00

# TGF-β/Smad 靶点化合物库 - 116 个小分子

## Catalog No.L4100

转化生长因子 - $\beta$ (transforming growth factor- $\beta$ ,TGF- $\beta$ ) 是属于一组新近发现的调节细胞生长和分化的 TGF- $\beta$ 超家族。在哺乳动物至少发现有 TGF- $\beta$ 1、TGF- $\beta$ 2、TGF- $\beta$ 3、TGF- $\beta$ 1 $\beta$ 2 四个亚型。许多细胞表面都有 TGF- $\beta$ 受体，例如：成纤维细胞、淋巴细胞、造血细胞等。转化生长因子 - $\beta$ (TGF- $\beta$ )信号通路在成熟有机体和发育中的胚胎中都参与了许多细胞过程，包括细胞生长、细胞分化、细胞凋亡、细胞动态平衡和免疫功能等。TGF- $\beta$ 与膜受体结合，受体再磷酸化 R-SMAD (Smad2 或 Smad3)，这些蛋白再与 coSMAD (Smad4) 结合成 R-SMAD/coSMAD 复合体作为转录因子在细胞核内聚集，参与靶基因表达的调控。

TargetMol<sup>®</sup>作为全球知名的化合物库供应商，积极关注科研动态，为您精选了 116 个特异性好的 TGF- $\beta$ /Smad 靶点相关的小分子化合物，用于相关信号通路研究及药物的筛选，可用于高通量、高内涵筛选

Pack Size	Price
100 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 15,780.00
250 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 26,340.00
1mg	RMB 26,340.00

# Wnt/Hedgehog/Notch库 - 74个小分子

## Catalog No.L4300

Wnt 信号通路在动物中高度保守，在动物胚胎发育中发挥重要作用，其异常表达或激活能引起肿瘤。Hedgehog (Hh) 信号通路在多种生理过程中起着关键作用，如胚胎发育及维持成人体内环境稳定等。近年来多项研究表明在皮肤基底细胞癌、髓母细胞瘤、肺癌、消化道肿瘤、乳腺癌等多种肿瘤组织中都存在 Hh 信号通路的异常激活，并与肿瘤的增殖分化、细胞凋亡、血管新生、侵袭转移等密切相关，提示异常激活的 Hh 信号通路在肿瘤发生、发展过程中其重要作用，阻断肿瘤中 Hh 信号通路将为人类肿瘤的治疗提供一个新的有效途径。Notch 信号通路广泛存在于脊椎和无脊椎动物，在进化上高度保守，通过相邻细胞之间的相互作用调节细胞、组织、器官的分化和发育。目前 Notch 信号异常已经与多种疾病联系起来，包括肿瘤、CADASIL 综合征、Alagille 综合征、脊椎肋骨发育不全等。

TargetMol® 可以为您提供多个 Wnt & Hedgehog & Notch 信号通路研究相关的优质产品，为您的相关信号通路研究及相关药物筛选提供有效工具。

Pack Size	Price
100 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 11,100.00
250 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 18,500.00
1mg	RMB 18,500.00

# 血管生成库 - 378个小分子

## Catalog No.L4800

血管生成是正常生长和发育过程以及伤口愈合和肉芽组织形成过程中的基本事件，然而异常的血管生成将导致各种疾病，例如肿瘤、糖尿病、免疫病、先兆子痫、肢体缺血等。因此，血管生成已成为治疗这些疾病的药物靶点。例如，血管生成与癌症发生密切相关，肿瘤通过分泌各种生长因子（例如VEGF）和蛋白质诱导毛细血管生成进入肿瘤，为癌细胞提供氧气和其他必需的营养物质，并及时运走代谢废物，血管生成也是肿瘤扩散或转移所必需的。因此血管生成抑制剂用于治疗癌症。此外，诱导血管生成，建立新的侧支循环是治疗缺血性心脑血管疾病（冠心病、脑卒中等）的极佳治疗方式。有效新生血管靶分子的筛选为相关疾病研究带来了广阔前景。

TargetMol® 为您精选了性价比最高，研究潜力最大的血管生成相关小分子集合，助力您的血管生成相关机理研究及相关药物研发。

Pack Size	Price
100 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 62,311.00
250 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 92,817.00
1mg	RMB 92,817.00

# 线粒体靶向库 - 168 个小分子

## Catalog No.L5300

线粒体是大多数真核细胞中存在的一种离散的细胞器，控制细胞代谢的基本速率，被称为“细胞的发电厂”。然而，线粒体的功能不限于提供细胞能量，线粒体是活性氧物质(ROS)的主要来源。ROS反映了细胞氧化应激的水平，在细胞凋亡、增殖、衰老等过程发挥重要的信号传导作用。此外，线粒体是细胞钙稳态的积极参与者。线粒体 Ca<sup>2+</sup> 积累调节多种功能，如有氧代谢和诱导细胞死亡。最后，线粒体 DNA (mtDNA) 的突变是许多线粒体代谢紊乱的原因，并且被认为通过促进细胞凋亡促进衰老。因此线粒体是药物治疗代谢性、退行性(神经退行性疾病)和过度增殖性疾病(癌症)的非常有吸引力的靶点。临床前和临床数据已经证明线粒体靶向方法具有相当大的潜力，小分子药物或生物制剂可通过各种途径作用于线粒体，包括 ETC 抑制、OXPHOS 解偶联、线粒体 Ca<sup>2+</sup> 调节和 ROS 控制等。

TargetMol® 线粒体靶向库收集了 168 种线粒体靶向相关的化合物，适合于线粒体靶向药物的研发和相关靶点研究。

Pack Size	Price
100 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 28,854.00
250 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 48,210.00
1mg	RMB 48,210.00

# 离子通道库 - 362 个小分子

## Catalog No.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、大脑和外周血管疾病、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 362 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。

Pack Size	Price
100 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 102,092.00
250 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 129,499.00
1mg	RMB 129,499.00

# 钙通道分子库 - 48 个小分子 ■ New

## Catalog No.L7200

钙通道是选择性转运钙离子的膜蛋白，其通过膜电压的去极化而打开，引起钙离子内流。钙通道在神经元、肌肉和其他可兴奋细胞以及一些不可诱导的细胞中广泛表达。由钙通道介导的功能包括肌肉收缩、神经元和神经内分泌细胞释放神经递质和激素以及控制基因转录。钙通道是细胞内多个信号传导通路（包括 G 蛋白和磷酸化）调节的靶标，因此钙通道在许多人类疾病中起关键作用，特别是心脏和神经系统疾病，包括疼痛，癫痫发作，高血压和偏头痛等。某些类型钙通道的药理学阻滞剂，已经用于临床治疗高血压和疼痛等疾病。某些钙通道阻滞剂对钙通道亚型具有高度选择性，开发更具选择性和更有效的靶向钙通道的药物的具有广阔的前景和意义。

Pack Size	Price
100 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 8,440.00
250 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 14,236.00
1mg	RMB 14,236.00

# 钾通道分子库 - 60 个小分子

## Catalog No.L7300

钾通道在离子通道中种类最多，存在最广，而且是最复杂的一类离子通道，几乎存在于所有生物体中。它们选择性跨膜转运钾离子，广泛分布于各种细胞类型，参与各种生理和病理反应，如细胞膜兴奋性的产生、神经递质的释放、保护心肌和抗心律失常等，而且和学习记忆的损伤、体温调控有着广泛的联系。钾通道阻滞剂，是一类可抑制K+通过膜通道的化合物，种类很多，有无机离子（如Cs、Ba等），有机化合物（如TEA、4-AP等），多种毒素（如蝎毒、蛇毒、蜂毒等）以及目前临床治疗药物。

TargetMol® 钾通道分子库集合了文献报道的多种钾通道的阻滞剂或激动剂，是筛选特异性和高效性的靶向钾通道药物的理想工具。

Pack Size	Price
100 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 10,550.00
250 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 17,795.00
1mg	RMB 17,795.00

# 钠通道分子库 - 62 个小分子 New

## Catalog No.L7400

钠通道是位于质膜上转导钠离子跨膜转运的离子通道。根据打开方式的不同，钠通道分为“电压门控”和“配体门控”两类。钠通道对于钠离子跨细胞膜的转运具有高度选择性。在神经元，肌细胞和某些神经胶质中，钠通道的开放是产生兴奋的关键环节。许多最常见的神经系统疾病，如癫痫，偏头痛，神经变性和慢性疼痛，都涉及神经元兴奋性的异常。并且许多实验数据表明钠通道的功能异常可能与这些病症的发病机理和 / 或进展有关。

几十年来，钠通道干扰药物已用于治疗癫痫发作、心率失常等多种疾病，钠通道的一个重要特性就是具有特异的激动剂和阻滞剂，钠通道还是许多特异性天然动植物神经毒素的作用靶点，TargetMol® 钠通道分子库集合了 62 种钠通道作用小分子，这些物质调控钠通道的电导、激活和失活，影响电信号的产生与传导的过程，是筛选钠通道相关疾病治疗药物的理想工具。

Pack Size	Price
100 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 11,000.00
250 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 18,000.00
1mg	RMB 18,000.00

# 趋化因子抑制剂库 - 27个小分子

## Catalog No.L7600

趋化因子是一类控制白细胞、淋巴细胞及其他免疫细胞定向迁移的蛋白质分子，其功能行使由趋化因子受体介导。通过基因敲除、抗体封闭及转基因技术已证明，趋化因子系统在病原体的清除、炎症反应、病原体感染、细胞及器官的发育、创伤的修复、肿瘤的形成及其转移、移植免疫排斥等方面都起着重要的作用，以趋化因子及其受体为控制靶点，通过激活或拮抗趋化因子受体的信号传导来调控趋化因子系统的功能，可望用于控制和治疗相关疾病。至今已发现了40多种人的趋化因子，将它们分为 4个亚类：CXC类（如IL 8）、CC类（如CCL 1）、CX3C类（如Fractalkine）和C类（如Lymphotactin），前两者最常见。趋化因子受体是一类介导趋化因子行使功能的GTP 蛋白偶连的跨膜受体(GPCR)，通常表达于免疫细胞、内皮细胞等细胞膜上。按趋化因子的分类，将同CC类趋化因子结合的受体称为CC类受体(CCR)，同CXC类趋化因子结合的受体称为CXC类受体(CXCR)，同样有C和CX3C受体(CR, CX3CR)。生物学功能的研究揭示趋化因子及其受体是当今最有前途的治疗炎症性疾病的靶点。目前已在制备各种趋化因子受体拮抗剂，有单克隆抗体、趋化因子变异体和小分子有机化合物。在未来的几年中很有可能就会从中筛选到治疗免疫相关疾病的有效药物。

我们收集了27种趋化因子或其受体抑制剂组成TargetMol® 趋化因子抑制剂库，是研究免疫相关疾病机理和药物筛选的有效工具。

Pack Size	Price
100 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 13,500.00
250 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 20,000.00
1mg	RMB 20,000.00

# 细胞周期化合物库 - 130个小分子

## Catalog No.L8100

细胞周期(cell cycle)是指增殖细胞从一次分裂结束到下一次分裂结束所经历的全过程，分为间期与分裂期两个阶段，间期又分为DNA合成前期(G1期)、DNA合成期(S期)与DNA合成后期(G2期)，分裂期也称为M期。细胞周期相关化合物依赖于不同的作用机制来调控细胞周期的正常进展。这些化合物中的一些干扰CDK / 细胞周期蛋白复合物，使细胞停留在G2 / M期边界，还有一些化合物影响CaMKII磷酸化，诱导G1期停滞。其他作用机制包括干扰RNA功能和抑制蛋白质合成。许多这些化合物由于它们中断细胞周期而最终诱导细胞凋亡，可用于抗肿瘤药的筛选。

TargetMol®细胞周期化合物库是130个细胞周期相关的小分子化合物的独特集合，用于细胞周期相关的研究及药物的筛选，可用于高通量、高内涵筛选。

Pack Size	Price
100 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 18,200.00
250 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 29,900.00
1mg	RMB 29,900.00

# HIF-1 化合物库 - 975 个小分子 New

## Catalog No.L8500

“氧感知通路”于2019年获诺贝尔生理学或医学奖，作为一种关键的调控蛋白，低氧诱导因子-1(hypoxia inducible factor-1, HIF-1)受到广泛关注，其普遍存在于人和哺乳动物细胞内，有相当广泛的靶基因谱，其中包括与缺氧适应、炎症发展及肿瘤生长等相关的近100种靶基因。

低氧诱导因子(HIF-1)在人类的代谢调节中，属于一个核心角色。在细胞中，HIF信号级联反应会受到缺氧状态的影响。在缺氧状态下，通常会让细胞持续的细胞分化。然而，缺氧状态促进了血管新生，对于胚胎中的血管系统与癌症肿瘤来说非常重要。伤口处的缺氧状态，也促进了角质细胞的移动与上皮组织的修护。在普遍情况下，HIF也是发育的重要关键。在哺乳动物中，若缺少了HIF-1的基因，将导致胎儿死亡。HIF-1已经被证实，对于软骨细胞的存亡有重大的影响，它能使软骨细胞适应在骨骼间生长板的缺氧环境。

揭示生物氧气感知通路，不仅在基础科学上有其价值，还有望带来创新的疗法。比如倘若能通过调控HIF-1通路，促进红细胞的生成，就有望治疗贫血。而干扰HIF-1的降解，则能促进血管生成，治疗循环不良。另一方面，由于肿瘤的生成离不开新生血管，如果能降解HIF-1α或相关蛋白(如HIF-2α)，就有望对抗恶性肿瘤。

为满足研究“氧感知通路”相关客户的需求，TargetMol®收集了975个HIF-1相关的小分子，涉及PI3K-AKT, MAPK, Ubiquitination等信号通路及HIF, HIF Prolyl-Hydroxylase, E1/E2/E3 Enzyme, PI3K, MAPK, Proteasome等靶点，可用于氧感知通路的相关药物开发和药理研究。

Pack Size	Price
100 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 117,000.00
250 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 185,250.00
1mg	RMB 185,250.00

# 泛素化化合物库 - 78 个小分子 New

## Catalog No.L8600

泛素化是泛素在一系列特殊的酶催化下对靶蛋白进行特异性修饰的过程，这些特殊的酶包括泛素激活酶、结合酶、连结酶和降解酶等。泛素化被认为是蛋白质翻译后修饰的一个重要途径，在细胞凋亡、细胞周期调控、DNA 损伤修复及膜转运等细胞过程中起重要作用，与肿瘤、心血管等疾病的发病密切相关。作为近年来生物化学研究的一个重大成果，泛素化已然成为研究、开发新药物的新靶点。

TargetMol® 泛素化化合物库收集了 78 种泛素化相关的小分子，作用靶点包括 proteasome, E1/E2/E3 Enzyme, DUB, p97 等，满足泛素化相关研究的客户需求。

Pack Size	Price
100 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 11,700.00
250 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 19,500.00
1mg	RMB 19,500.00

# 铁死亡化合物库 - 320 个小分子 New

## Catalog No.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 320 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。

Pack Size	Price
100 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 42,250.00
250 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 70,400.00
1mg	RMB 70,400.00

# 细胞凋亡化合物库 - 733 个小分子

Catalog No.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、炎性疾病和病毒感染。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。“细胞凋亡在神经退化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 733 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。

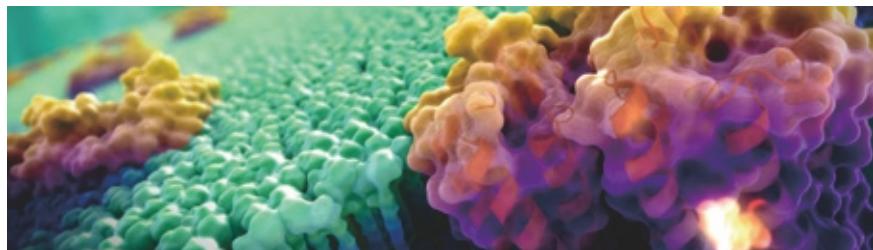
Pack Size	Price
100 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 93,355.00
250 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 168,040.00
1mg	RMB 168,040.00

# 磷酸酶抑制剂化合物库 - 24个小分子

Catalog No.L9100

磷酸酶抑制剂化合物库是24种已知活性的磷酸酶抑制剂的集合，可用于化合物筛选、化学基因组学、药理分析等方面。

Pack Size	Price
100 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 9,800.00
250 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 14,500.00
1mg	RMB 14,500.00



# 特色活性库



## 经典已知活性库 - 7065 个小分子

Catalog No.L4000

### 产品描述

经典已知活性库是 7065 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，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。

包含 L4000 已知活性库在内，陶素生化可以提供多达 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。

### 产品特性



7065个已知活性化合物的集合，可用于细胞诱导和靶点确认；



涵盖多个疾病研究领域，如癌症、代谢、免疫和心血管系统等；



详细的说明书，化合物结构、靶点信息、IC50值、活性描述等；



NMR、HPLC/LCMS等多种检测技术保证产品结构正确，纯度高，减少假阳性。

### Pack Size

### Price

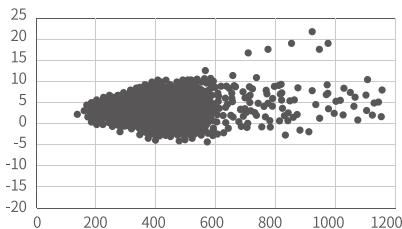
100 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 482,945.00
250 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 729,970.00
1mg	RMB 729,970.00

## 类药性参数分析

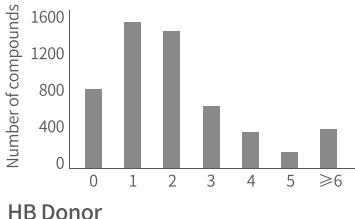
### % of compounds compliant with Lipinski's Rules

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

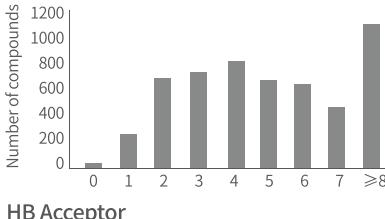
cLogP vs MW



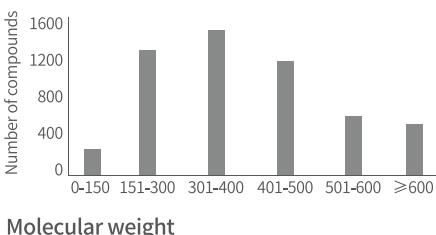
### Distribution of HB Donors



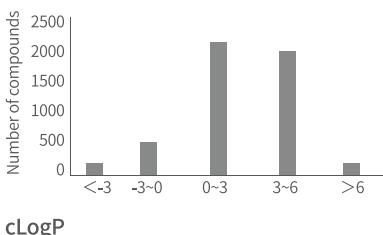
### Distribution of HB Acceptors



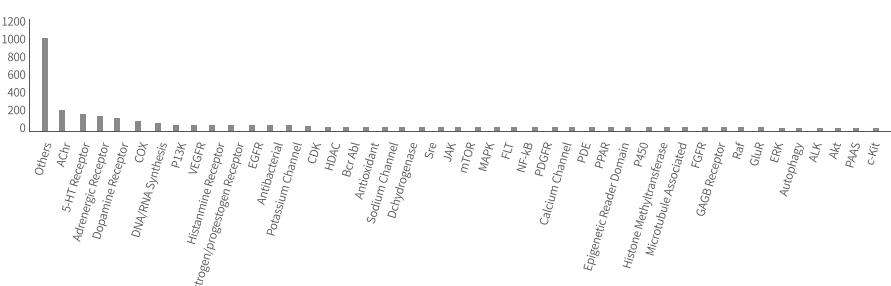
### Distribution of Molecular weight

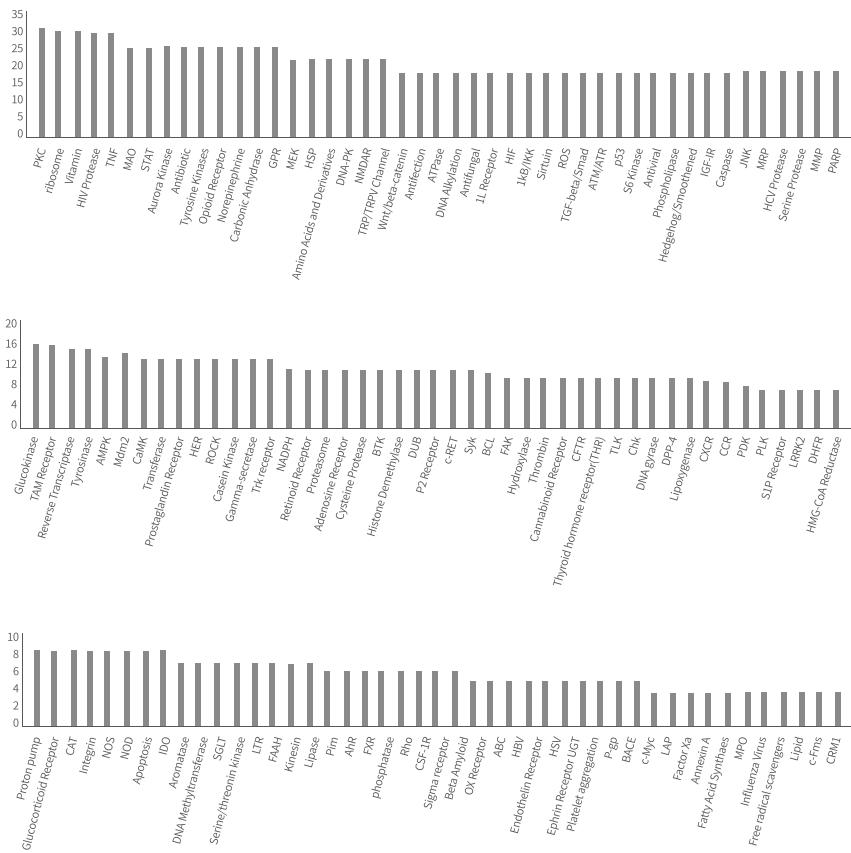


### Distribution of cLogP

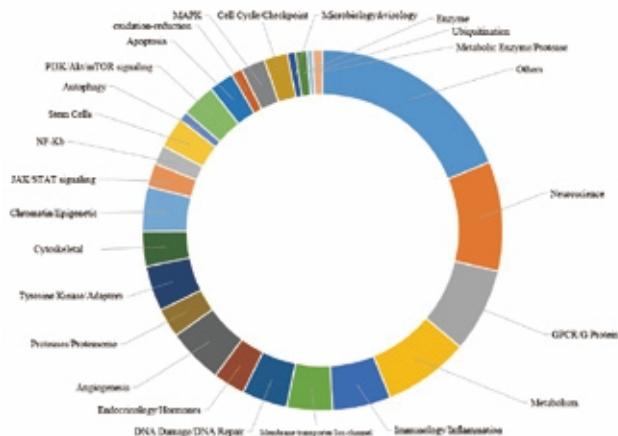


### 靶点组成





## 信号通路组成



## 其他相关化合物库推荐

名称	数量	描述
上市药物库 (详见第10页)	2272	上市药物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,是老药新用、新的药物靶点筛选的有效工具;由于活性明确,靶点已知,也可以用于细胞诱导分化。
临床药物库 (详见第04页)	1336	库中所有化合物均已被批准进入临床期,按临床一期、二期、三期等进行分类。临床期小分子药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。
天然产物库 (详见第71页)	2592	来源清晰:精选来自动物、植物、微生物的已知活性天然产物;更具体到植物种属,并标注准确英文名与拉丁名,方便后期研究确证。结构多样性好:2592种天然产物,含包括黄酮类、生物碱类在内的30多种化合物类型,拥有详细的分类信息。信息全面:从化合物结构到溶解度,从信号通路、作用靶点到生物活性信息均有详细描述。性价比高:剔除了价格昂贵但成药性差的天然产物,用更少的成本得到更多高品质的天然产物。

## 经典已知活性库补充库 - 990 个小分子 Catalog No.L4150

从已知活性库 Plus 中精选而来,在不减少靶点前提下,每个靶点只选取 1-15 个评分最高(活性值、药理性质、结构多样性等)的化合物,组成包含 990 种化合物的经典已知活性库补充库,结构比已知药物更新颖,比类活性化合物具有更多的活性信息,筛选命中率更高。是对经典已知活性库的补充,也是新药发现、靶点鉴定强有力的工具化合物库。

Pack Size	Price
100 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 71,280.00
250 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 108,900.00
1mg	RMB 108,900.00

# 已知活性库Plus - 7647 个小分子

Catalog No.D7800

已知活性库Plus是7647种具有生物活性,能引起细胞、组织甚至个体生物学反应的化合物的集合,是对经典已知活性库(5788种化合物)的补充。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,是助力新药发现的有效工具。支持计算化学数据格式,可进行虚拟筛选。

Pack Size	Price
100 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 423,500.00
250 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 641,350.00
1mg	RMB 641,350.00

# 3D已知活性库-3万个小分子

Catalog No.D8800

3D已知活性库是Pubmed收录的3万个有生物活性的小分子化合物。3D (3Diversities) 是指该库的分子结构,作用靶点和药效团的多样性都非常好。这些小分子较上市药物更为新颖,比类药化合物更易发现活性,是助力新药发现的有效工具,可以快速帮您实现高通量、高内涵药物筛选目标。这些产品经过六步过滤,从160万个化合物分子挑选出来的3万个产品,毒性较小,活性较强,性质相对稳定,结构、靶点、药效团多样,且后期修饰较为容易。我们同时免费提供SDF数据文件,便于药理研究和计算机虚拟筛选,助力您科研的各方面需求。

- 01 从160万个化合物中剔除148万,仅保留有活性注解或文献参考的12万个产品。
- 02 去除不稳定易反应的产品,降低Hit结构优化难度。
- 03 去除有毒产品,降低先导化合物药理、毒理研究中可能出现的不利风险,加速进入临床期。
- 04 选择活性效果好的产品,例如有效浓度小于10μM的产品。每种结构历经不断的活性模拟,只为给您最安心的选择。
- 05 过滤掉专一性差的产品,留下靶点特异性强的小分子化合物,提高筛选效率与成功率。
- 06 根据3D结构和药效官能团的特征,将剩余产品分组,去除结构或官能团相似的产品,只保留结构最具代表性的产品30,000个,免费提供SDF数据文件,便于药理研究和计算机虚拟筛选。子化合物,提高筛选效率与成功率。

# 药物功能重定位化合物库 - 3000 个小分子 New

## Catalog No.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 3000 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。

Pack Size	Price
100 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 204,000.00
250 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 354,000.00
1mg	RMB 354,000.00

# 转录因子库 - 449 个小分子

## Catalog No.L1380

转录因子能够与基因上特定的核苷酸序列结合，从而调控基因的转录。基因转录的活化和抑制在细胞生理活动中起着重要作用，影响细胞发育和细胞间信号传导、调节细胞周期。

陶素生化收集 449 种转录因子靶向的新颖活性小分子组成转录因子库，该库覆盖 13 种不同的转录因子靶点，活性值均小于 2.5 μM。是细胞分化、细胞周期调节、转录因子相关研究的补充工具。

Pack Size	Price
100 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 58,370.00
250 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 99,229.00
1mg	RMB 99,229.00

# 核苷类化合物库 - 120 个小分子 New

Catalog No.L1720

核苷类药物是临幊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 120 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。

Pack Size	Price
100 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 16,800.00
250 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 27,600.00
1mg	RMB 27,600.00

# 内分泌激素分子库 - 297 个小分子

Catalog No.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 297 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。

Pack Size	Price
100 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 39,197.00
250 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 65,340.00
1mg	RMB 65,340.00

# 人内源代谢化合物库 - 665个小分子

Catalog No.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、糖类等。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 665 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。

Pack Size	Price
100 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 77,230.00
250 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 110,340.00
1mg	RMB 110,340.00

# 氧化还原化合物库 - 118个小分子

Catalog No.L2900

氧化还原化合物库含有118种具有确定的促氧化或抗氧化活性的化合物。包括各种结构和机理上不同的化合物,例如氢过氧化物、多酚、金属螯合剂、硫醇、巯基捕集剂、自由基清除剂和谷胱甘肽调节剂。该化合物库是研究促氧化和抗氧化分子在细胞中的作用以及体外药物研究的有效工具。

Pack Size	Price
100 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 9,370.00
250 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 15,620.00
1mg	RMB 15,620.00

# 造血毒性小分子库 - 104个小分子

Catalog No.L3100

TargetMol®造血毒性小分子库汇集了104种小分子化合物，它们对造血系统功能具有不同程度的毒性作用，包括骨髓抑制、中性粒细胞减少、白细胞减少、贫血和其他功能，在结构和机制上都具有代表性。所有的产品都是经过生物活性测试的，可以查到相关的文献报道。其中部分产品为已经上市的小分子药物，这些小分子化合物可以提供1mg, 5mg不等的包装，并且绝大部分产品可以提供后期的重复供应，为生物和药理科学家们的工作提供了优秀的实验工具进行细胞诱导以及药理和毒理的相关研究。

Pack Size	Price
100 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 12,150.00
250 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 20,240.00
1mg	RMB 20,240.00

# 组蛋白修饰化合物库 - 152个小分子

Catalog No.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观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152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。

Pack Size	Price
100 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 20,824.00
250 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 34,808.00
1mg	RMB 34,808.00

# 抗生素库 - 379 个小分子

## Catalog No.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<sup>®</sup> 抗生素库是有 379 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。

Pack Size	Price
100 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 48,200.00
250 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 75,480.00
1mg	RMB 75,480.00

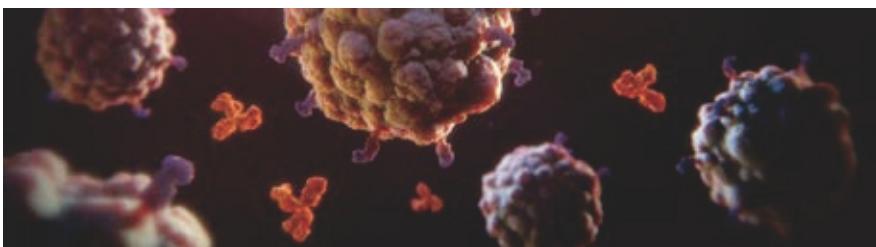
# 心血管毒性库 - 132 个小分子

New

## Catalog No.L4900

由于心脏毒性，许多药物在临床研究中失败；因此，开发能够评估对心肌细胞潜在不良影响的敏感体外试验对于药物开发至关重要。Targetmol<sup>®</sup> 提供心脏毒性的靶向库，是 132 种心血管毒性化合物的独特集合，以促进您的预测毒理学研究。

Pack Size	Price
100 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 17,954.00
250 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 29,973.00
1mg	RMB 29,973.00



# 含氟化合物库 - 586 个小分子

Catalog No.L5100

氟原子的引入常常导致有机化合物产生独特的物理、化学性质和生物活性，因而有机氟化物被用于从药物化学到材料科学等多个领域中。有机氟化物在医药工业中有非常重要的应用。目前上市的新药中，每年大约有 15-20% 都是有机氟化合物。在含氟的药物分子中，每个引入的氟原子或含氟基团都有其特定的目的。总体上看，氟原子对药物分子的影响主要有：

氟的引入不使分子发生明显的立体构型变化，但使分子的电子性质产生很大的改变。氟的引入对于分子的亲脂性是有利的，具有更好的生物穿透性。

通过向底物引入氟原子，可以选择性地阻断一些不希望发生的代谢途径，让药物前体只转化为希望的生物活性物质，增加药物的生物利用度，稳定代谢。

基于氢原子与氟原子在体积上的相似性和在反应性上的根本差别而发挥作用。5-氟尿嘧啶是此类抑制剂中最著名的一个例子。

因此，含氟药物的应用研究越来越深入。TargetMol<sup>®</sup> 含氟化合物库是开发新的抗癌药物、抗肿瘤药物、抗病毒药物、消炎药物等的有效工具。在现代农作物保护方面，含氟农用化学品已广泛用作除草剂、杀虫剂以及杀菌剂等。

Pack Size	Price
100 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 79,012.00
250 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 131,423.00
1mg	RMB 131,423.00

# 毒性化合物库 - 277个小分子

Catalog No.L5500

Targetmol<sup>®</sup> 毒性化合物库包含277个人工合成或天然存在的有机小分子，这些物质是能够改变细胞、代谢和膜功能的化合物，例如：DNA合成干扰剂、酶抑制剂、受体阻断剂、膜活性化合物等细胞毒性化合物。这些化合物有些是没有继续研发的，有些是由于毒性或者其他原因停止了研究。也有些作为杀虫剂和除草剂使用。从DNA合成损害到细胞增殖毒性，从免疫抑制到内分泌干扰，Targetmol<sup>®</sup> 毒性化合物库为您提供来源广泛、针对性强、研究明确的毒物小分子化合物，这些化合物的多样性可以增加科学家实验的视野，同时也可能揭示新的未知活性，是综合化筛选、针对性研究的有力工具。

Pack Size	Price
100 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 36,500.00
250 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 48,514.00
1mg	RMB 48,514.00

# 药物代谢杂质库 - 200个小分子

Catalog No.L5800

随着科研深入，科学家们发现已经上市的药物异构体/代谢产物中很多都是有明确的生物活性的。比如：左丙氧芬(levopropoxyphene)曾是FDA批准的镇咳药，而它的旋光异构体右丙氧芬(Dextropropoxyphene)是则有镇痛效果。再比如右旋索它洛尔属于III类抗心律失常药，而左旋体则为 $\beta$ -受体阻滞剂。这些化合物在科研上已有的药理评价数据较为丰富，作为老药新用的切入点较为理想。

TargetMol®作为全球知名的化合物库供应商，积极关注科研动态，药物代谢杂质库共有200种产品，多样性好，重复供应能力强，为您提供药物筛选的一站式服务。

Pack Size	Price
100 $\mu\text{L}$ * 10 mM (in DMSO)	RMB 18,000.00
250 $\mu\text{L}$ * 10 mM (in DMSO)	RMB 30,000.00
1mg	RMB 30,000.00

# 血脑屏障通透化合物库 - 421个小分子

Catalog No.L5900

血脑屏障是由毛细血管内皮细胞及其之间的紧密链接组成，保护大脑免受外界异质物质的破坏，限制物质分子扩散进入中枢神经系统，由于血脑屏障的阻碍作用，脑肿瘤等疾病的化疗功效也受到很大影响。因此治疗大多数脑疾病的主要挑战是将治疗药物穿过血脑屏障递送到大脑的特定区域，在针对 CNS 靶标筛选库的设计中选择能够穿透血脑屏障的分子，对于整个 CNS 药物发现过程起着至关重要的作用。

基于相关文献报道及如下五个原则：(1) 化学结构上亲脂性好，亲水性弱；(2) 和血浆蛋白的结合弱；(3) 分子量不宜过大；(4) 已经证实的可以通过血脑屏障起作用的上市药物和临床药物；(5) 和 CNS 相关靶点对应的小分子，我们精心挑选了 421 个化合物，这些化合物都可以穿过血脑屏障、有明确作用靶点、生物活性验证有效，用于 CNS-Penetrant 相关的研究及中枢神经系统疾病药物的筛选，可用于高通量、高内涵筛选。

Pack Size	Price
100 $\mu\text{L}$ * 10 mM (in DMSO)	RMB 55,580.00
250 $\mu\text{L}$ * 10 mM (in DMSO)	RMB 92,620.00
1mg	RMB 92,620.00

# 活性脂质化合物库 -280 个小分子

## Catalog No.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)是最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 280 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。

Pack Size	Price
100 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 36,900.00
250 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 61,600.00
1mg	RMB 61,600.00

# 凝血与抗凝化合物库 - 154 个小分子

## Catalog No.L7500

凝血指的是血液由液体状态转变为不流动的凝胶状态的过程,是生理性止血的重要环节。血液凝固的实质就是血浆中的可溶性纤维蛋白原变成不可溶的纤维蛋白的过程。参与凝血过程的物质统称为凝血因子,凝血过程是一个复杂的过程,可以大致划分为三个阶段,分别是凝血酶原激活物形成、凝血酶原转化为凝血酶和纤维蛋白原转化为纤维蛋白。与此同时,为了防止正常情况下意外形成血栓,或者出血部位形成的血栓不受控制,机体还有抗凝机制和纤溶机制对抗凝血机制。凝血机制与抗凝机制的动态平衡是机体防止血液丢失和维持血液流动状态的关键,目前认为,抗凝机制主要有血管内皮的屏障作用、纤维蛋白吸附、单核巨噬细胞系统吞噬和生理性抗凝物质。

Pack Size	Price
100 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 18,900.00
250 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 29,110.00
1mg	RMB 29,110.00

# 神经再生化合物库 - 149个小分子

## Catalog No.L7700

众所周知，神经系统疾病是严重危害人类健康的疾病之一，神经损伤后的治疗、再生和功能恢复是医学领域的历史性难题。虽然临幊上针对神经损伤及神经退行性疾病采用了药物、手术、组织工程、针灸等多种手段，但目前仍缺乏明确有效的治疗措施，要想提高神经损伤治疗效果，必须弄清神经再生相关机制。近些年来，随着神经再生研究的不断深入，人们逐渐认识到，Rho-ROCK、Notch、MAPK、Wnt/β-catenin、mTOR、Eph-ephrin等信号通路与神经再生密切相关。神经系统损伤后往往会产生多种应激信号，究竟哪些或哪种信号会对神经再生起到更为深刻的影响尚未可知。

TargetMo<sup>®</sup> 神经再生化合物库把众多与神经再生相关的信号通路的激动剂或抑制剂集合在一起，是筛选神经再生诱导剂的有效工具。

Pack Size	Price
100 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 10,300.00
250 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 15,760.00
1mg	RMB 15,760.00

# 成骨分子库 - 80个小分子

## Catalog No.L7900

人类的骨质是由成骨细胞进行骨质的合成和破骨细胞进行骨质的降解相协调统一的结果。成骨与破骨过程的平衡是维持正常骨质的关键。老年人的骨质分解代谢超过了合成代谢，导致了骨质疏松等病症。成骨细胞是骨形成的主要功能细胞，负责骨基质的合成、分泌和矿化。目前，随着研究的不断深入，在骨形成过程中，成骨细胞发展及其调控的分子机制也逐渐得以揭示。成骨细胞在骨形成过程中要经历成骨细胞增殖、细胞外基质成熟、细胞外基质矿化和成骨细胞凋亡四个阶段。很多因素可调节这几个阶段，从而最终调控骨形成。

Targetol<sup>®</sup> 作为全球知名的化合物库供应商，积极关注科研动态，通过检索近几年国内外成骨分化及成骨相关信号通路研究的文献，发现多条信号通路参与成骨细胞增殖与分化，其中，BMP-SMAD、Wnt/β-Catenin、Notch、Hedgehog、MAPK、FGF 信号通路在成骨分化过程中最为关键。多条信号通路间存在着相互作用，构成了一个复杂的调控网络。成骨分子库集合了80种文献报道的成骨相关的生物活性分子，适合于成骨相关机理研究及药物筛选。

Pack Size	Price
100 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 13,500.00
250 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 20,000.00
1mg	RMB 20,000.00

# 干细胞分化化合物库 - 340个小分子

## Catalog No.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-3β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 340 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。

Pack Size	Price
100 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 44,887.00
250 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 74,800.00
1mg	RMB 74,800.00

# 抗衰老化合物库 - 1600个小分子

## Catalog No.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。

Pack Size	Price
100 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 224,200.00
250 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 344,870.00
1mg	RMB 344,870.00

# 染色质修饰分子库 - 192个小分子

## Catalog No.L8300

染色质化学修饰是指对染色质的组成成分进行化学基团的添加或去除的反应过程，常见的染色质化学修饰方式有：甲基化 - 去甲基化、乙酰化 - 去乙酰化、磷酸化 - 去磷酸化，此外，还包括泛素化、ADP- 核糖基化和二硫键形成等修饰方式。染色质中的组蛋白和 DNA 是最主要的化学修饰底物。目前，已在细胞中发现了一系列的染色质修饰酶类，这些酶不仅具有高度的位点特异性，而且对底物原有的修饰状态也有选择性。由于染色质化学修饰而导致某些基因沉默或异常表达，从而引起个体表型的改变，称为表型遗传修饰。TargetMol<sup>®</sup> 作为全球知名化合物库供应商，积极关注科研动态，为您提供大量染色质修饰相关的优质产品，致力于提供药物筛选领域的全流程的一站式服务。

Pack Size	Price
100 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 31,240.00
250 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 47,970.00
1mg	RMB 47,970.00

# 大环化合物库 - 103个小分子 New

## Catalog No.L9300

大环化合物在药物的研发领域有着相当重要的意义，在很多新型药物研发的进程中，大环化合物类药物一直都是医药学领域的较为常见的研究对象。大环化合物正成为针对低成药性靶点的公认的成功方法，例如抗微生物、抗病毒和蛋白质-蛋白质相互作用 (PPI) 的靶点。拓扑学上，与同等分子量的非环状分子相比，大环化合物具有跨过大表面积并同时保持构象限制的独特能力。大环化降低了整体极性并增强了膜的渗透性。这些属性结合在一起使得大环化合物成为针对低成药性靶点的强有力的方法。

很多大环类化合物作为药物在抗菌、抗病毒、抗肿瘤等方面，在临床上的应用已是非常广泛，研究日益活跃。抗菌方面，如大环内酯类、环肽类、氮杂大环类化合物等，具有抗菌谱广、抗菌活性强、疗效显著和不易产生耐药性等特点；抗病毒方面，举例来说，临床应用的甘昔洛韦、西多福韦等抗疱疹病毒药物存在副作用强、抗病毒活性差等弱点，目前，萘啶类化合物的研究正受到广泛重视，已经有借助计算机技术合成的萘啶类化合物表现出很强的抗疱疹病毒活性；抗肿瘤方面，如埃坡霉素，作用机制与紫杉醇类似，同时克服了紫杉醇的弱点，且对已经产生紫杉醇耐药的细胞有很强的细胞毒性。随着化学合成技术的不断发展及从天然产物中大环先导化合物的不断发现，同时，基因组序列、生物信息学及遗传学工具可利用度的不断提高等，都标志着探索大环类药物新时代的到来。随着研究的进一步深入，大环类药物将会具有更加光明的应用前景。

Pack Size	Price
100 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 24,360.00
250 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 53,000.00
1mg	RMB 24,360.00

# PPI抑制剂库 - 143个小分子

New

Catalog No.L9400

蛋白 - 蛋白相互作用 (PPI) 在生物过程中扮演非常重要的角色，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。

Pack Size	Price
100 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 21,400.00
250 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 35,800.00
1mg	RMB 35,800.00

# 表型筛选靶点鉴定库 - 1832个小分子

New

Catalog No.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1832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。

Pack Size	Price
100 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 151,700.00
250 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 231,800.00
1mg	RMB 231,800.00

# 新增化合物库

## FDA上市及药典收录分子库 - 2897个小分子 New

Catalog No.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最有利的线索。

陶术FDA上市及药典收录分子库收集了2897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。

Pack Size	Price
100 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 130,360.00
250 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 234,640.00
1mg	RMB 234,640.00

## 肝脏毒性化合物库 - 595个小分子 New

Catalog No.L5510

药物性肝损伤(drug-induced liver injury, DILI)是一种常见的药物不良反应，在药物性靶器官毒性中排第二位，仅次于心脏毒性，是导致药物研发终止或从市场撤回的重要原因之一。因此，药物的肝脏毒性正日益受到医学界、社会公众和药监部门的广泛关注和重视。

DILI已被证实是一个由多种机制参与的复杂病理过程，其中包括肝脏的结构和功能完整性的直接损害(例如线粒体功能障碍)；产生改变肝细胞结构和功能的代谢产物；产生能与肝蛋白结合的反应性药物代谢产物，从而产生新的抗原性药物-蛋白质加合物，这些新的加合物被宿主的防御系统所针对(半抗原假说)，并引发损害肝脏的全身超敏反应(即药物过敏)。

TargetMol®肝脏毒性化合物库包含595个能够引起肝损伤的化合物，这些化合物包括抗肿瘤药物、抗生素药物、抗精神疾病药物、心血管药物等，是开展DILI和相关药物毒理学研究的有力工具，对于了解DILI发病机制，找到预测其发生、进展的生物标志物，最终有效防控DILI具有重要价值。

Pack Size	Price
100 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 80,220.00
250 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 133,440.00
1mg	RMB 133,440.00

# 共价抑制剂库 - 670个小分子

Catalog No.L9410

New

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、 $\beta$ -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药物，相较于非共价药物，由于其特殊的药代动力学性质，使得共价药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氰基、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，陶术收集了670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，1-丁-2-炔基，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~

Pack Size	Price
100 $\mu$ L * 10 mM (in DMSO)	RMB 77,810.00
250 $\mu$ L * 10 mM (in DMSO)	RMB 111,170.00
1mg	RMB 111,170.00

# 高通量筛选 用2131个天然产物



## 高通量筛选天然产物库 - 2592个小分子

Catalog No.L6000

### 产品描述

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最成功的来源，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。

### 产品特性

- 来源清晰** 精选来自动物、植物、微生物的已知活性天然产物；更具体到植物种属，并标注准确英文名与拉丁名，方便您的后期研究确证。
- 多样性好** 2592种天然产物，含包括黄酮类、生物碱类在内的30多种化合物类型，拥有详细的分类信息。
- 信息全面** 从化合物结构到溶解度，从信号通路、作用靶点到生物活性信息均有详细描述。
- 性价比高** 剔除了价格昂贵但成药性差的天然产物，让您用更少的成本得到更多高品质的天然产物。
- 高度定制** 可根据天然产物来源、天然产物类别、研究领域、药物市场状态等方面自由组合，高度定制。

天然产物库

### Pack Size

### Price

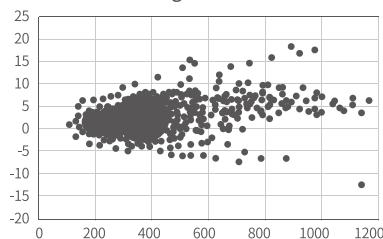
100 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 209,970.00
250 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 345,240.00
1mg	RMB 345,240.00

### 类药性参数分析

#### % of compounds compliant with Lipinski's Rules

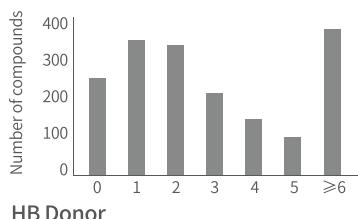
PhysChem Properties	% Compounds
<5 HBond donors	73
<10 HBond acceptors	80
cLogP<5	91
MW<500	79

cLogP vs MW

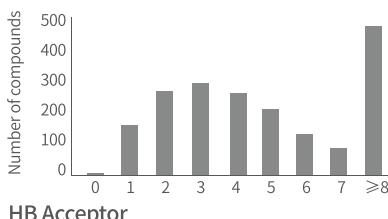


## 类药性参数分析

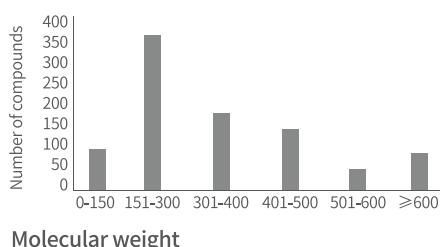
Distribution of HB Donors



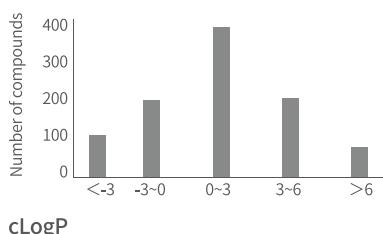
Distribution of HB Acceptors



Distribution of Molecular weight

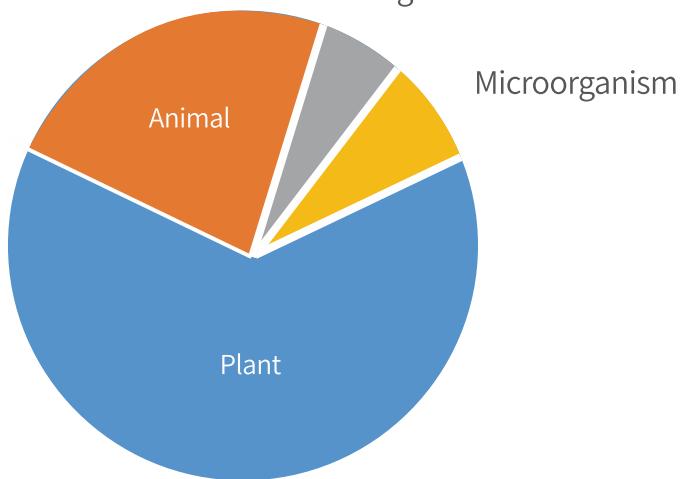


Distribution of cLogP

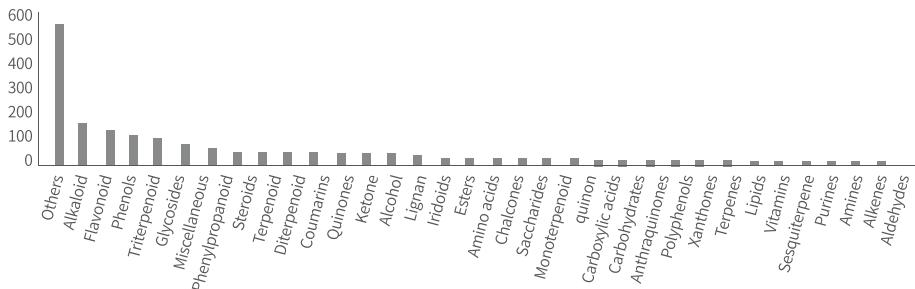


## 来源组成

Organism



## 种类组成



## 其他相关化合物库推荐

名称	数量	描述
上市药物库 (详见第10页)	2272	上市药物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，是老药新用、新的药物靶点筛选的有效工具；由于活性明确，靶点已知，也可以用于细胞诱导分化。
临床药物库 (详见第04页)	1336	库中所有化合物均已被批准进入临床期，按临床一期、二期、三期等进行分类。临床期小分子药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。
经典已知活性库 (详见第52页)	7065	经典已知活性库是7065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。



可单独挑选天然产物

## 天然产物单体化合物库 - 16563个天然产物

Catalog No.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。陶术生物针对这一问题，精选5100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。陶术生物的5100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。

天然产物衍生物4000个

## Natural-Product-Based Library

Catalog No.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。

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 4000 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。

Pack Size

Price

100 μL \* 10 mM (in DMSO)

RMB 298,000.00

# 中国药典收录天然产物库 - 564个小分子

## Catalog No.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种人参皂苷成分。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。

陶术生物精选了 564 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。

Pack Size	Price
100 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 77,500.00
250 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 129,700.00
1mg	RMB 129,700.00



# 生物碱类天然产物库 - 228个小分子 New

Catalog No.L6110

生物碱是一类活性较强的含氮有机化合物，在中药材中广泛存在，其药用功能逐渐被推广。众多研究发现生物碱的药理活性众多，包括抗肿瘤、抗炎镇痛、抗菌抗病毒、心血管作用、杀虫等。随着对生物碱的深入研究，其将为疾病的治疗提供新的药物来源。

TargetMol®生物碱类天然产物库精选228种生物碱类的天然产物，来源包括乌头、长春花、喜树、莨菪、黄连等多种中药材，具有抗肿瘤、抗炎、抗氧化、神经保护等多种功能，例如：从长春花中分离出的生物碱对多种肿瘤细胞有较好的抑制作用，石蒜碱被认为具有很强的抗病毒活性及抗菌作用，延胡乙素等多种异喹啉生物碱具有镇痛活性等。该库可以为从事药物开发和药理研究的客户提供有力工具。

Pack Size	Price
100 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 33,780.00
250 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 56,300.00
1mg	RMB 56,300.00

# 萜类天然产物库 - 239个小分子 New

Catalog No.L6130

萜类化合物是一类骨架多样、数量庞大、生物活性广泛的重要药物化学成分，是异戊二烯的聚合体及其衍生物，其骨架一般以五个碳为基本单位。萜类化合物在植物界分布较为广泛，据不完全统计种类已超过了22000多种。研究发现萜类化合物具有多种生理活性，如抗炎、抗疟、抗肿瘤、降血压等，进行萜类化合物筛选研究，可以为萜类化合物的应用提供研究基础。

TargetMol®萜类天然产物库收集了239种萜类天然产物，包括单萜、倍半萜、二萜、三萜、四萜等结构类型，涵盖癌症、免疫、炎症、代谢等多个研究领域，该库可以为从事药物开发和药理研究的客户提供有力工具。

Pack Size	Price
100 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 35,420.00
250 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 59,000.00
1mg	RMB 59,000.00

# 黄酮类天然产物库 - 160个小分子 New

## Catalog No.L6120

黄酮，是指两个具有酚羟基的苯环(A-与B-环)通过中央三碳原子相互连结而成的一系列化合物，其基本母核为2-苯基色原酮。黄酮类化合物是中草药中重要的活性物质之一。黄酮类化合物的主要药理作用有抗氧化、抗菌、抗肿瘤以及对心脑血管的保护作用等，其功能涉及清除自由基、炎症通路调控、能量感受通路调控、细胞周期调节等多种复杂机制。例如：黄芩、草豆蔻、红景天和淫羊藿等中药中含有的黄酮类可作为优良的ROS清除剂，在蠕虫中已证明黄酮类化合物可以降低氧化应激水平，银杏叶黄酮具有抗炎症、抗环腺苷酸乙酯酶活性、抗组胺活性等多种效用。

TargetMol<sup>®</sup>黄酮类天然产物库收集了160种黄酮类的天然产物，来源包括银杏、苦参、黄芪、忍冬、淫羊藿等多种传统中药材，库中化合物涉及多种生理功能，如芦丁、槲皮素具有扩张冠脉血管作用，橙皮苷具有抗炎作用，木犀草素、黄岑素、黄芩苷均具有一定程度抗菌作用，金雀异黄酮具有抗肿瘤作用等。该库可以为从事药物开发和药理研究的客户提供有力工具。

Pack Size	Price
100 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 23,710.00
250 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 39,500.00
1mg	RMB 39,500.00

# 中药抗炎分子库 - 319个小分子 New

## Catalog No.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，抗炎药物在临幊上已经是仅次于抗感染药物的第二大类药物。临幊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。

Pack Size	Price
100 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 47,260.00
250 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 78,770.00
1mg	RMB 78,770.00

# 植物来源化合物库 - 1268个小分子

## Catalog No.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;青蒿素来自中国传统植物青蒿,用于对抗多药耐药性疾病;水飞蓟素从水飞蓟种子中提取,用于治疗肝脏疾病。

TargetMol<sup>®</sup>植物来源化合物库精选来自277类植物的天然化合物,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。

Pack Size	Price
100 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 110,820.00
250 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 174,960.00
1mg	RMB 174,960.00

# 天然多酚类化合物库 - 367个小分子

## Catalog No.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,其特征在于存在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367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。

Pack Size	Price
100 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 54,371.00
250 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 90,618.00
1mg	RMB 90,618.00

# 药食同源库 - 305个小分子

## Catalog No.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 305 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。

Pack Size	Price
100 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 41,920.00
250 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 70,150.00
1mg	RMB 70,150.00

# 微生物天然产物库 - 94个小分子

## Catalog No.L6500

微生物是包括细菌、病毒、真菌以及一些小型的原生动物等在内的一大类生物群体，它个体微小，却与人类生活密切相关。微生物来源的天然产物为人类健康作出了巨大贡献，1945年和1952年的诺贝尔医学与生理学奖分别颁给了青霉素 (penicillin) 和链霉素 (streptomycin) 的发现，而在60多年后的2015年，诺贝尔医学与生理学奖又颁给了阿维霉素 (avermectin) 和青蒿素 (artemisinin) 的发现。在这四个获奖天然产物里除了青蒿素外其余三个均来源于微生物。来源于微生物及发酵液的有效成分主要有多糖类、酶类、抗生素类、氨基酸类、维生素类等等。比如，放线菌是天然药物的重要来源，抗癌药物放线菌素 (dactinomycin) 和博来霉素 (bleomycin)、抗菌药物万古霉素 (vancomycin) 和达托霉素 (daptomycin) 都是放线菌中发现的、未经过化学修饰直接成药的天然产物。

TargetMol®作为全球知名的化合物库供应商，积极关注科研动态，TargetMol®微生物天然产物库汇集了94种微生物来源的天然产物，其结构类型涵盖β-内酰胺类化合物、大环内酯类化合物、氨基糖苷类化合物、多肽、氯霉素类化合物、四环素类化合物、葸类化合物、苯衍生物、酚类化合物、萜类化合物等化合物类型。化合物库提供的信息包括化合物的名称、分子量、分子式、结构类型、CAS号、化合物的物理性质如熔沸点、旋光度、溶解度、三维结构、化合物的来源、分离提取方法和生物活性数据、相关文献以及专利信息。微生物天然产物库可以用于合理药物设计、虚拟药物筛选、微生物分类等领域的研究。

Pack Size	Price
100 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 18,350.00
250 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 28,200.00
1mg	RMB 28,200.00

# 胃肠炎天然产物库 - 112个小分子

## Catalog No.L6600

文献报道，美国每年有 1.79 亿人患有急性胃肠炎，因并发症而死亡的人数逐年增加，给患者的身心健康带来巨大痛苦。胃肠炎是一个模糊的概念，包括胃溃疡、克罗恩病、溃疡性结肠炎、阑尾炎等疾病。天然产物具有多种生物活性，包括免疫增强功能、抗氧化、抗肿瘤、抗癌、降血糖、肾保护、增强胃肠功能等。胃肠道是多种天然产物发挥生物学活性的重要场所，调节胃肠道的运动，保护胃黏膜，与肠道菌群相互影响以及与肠道粘膜免疫系统相互作用。了解天然产物对胃肠道功能的影响，对于相关疾病的治疗和新药筛选具有重要意义。

TargetMol® 胃肠炎天然产物库是 112 种胃肠炎相关的生物活性小分子化合物的特有集合，是研究胃肠道功能及相关疾病和新药筛选的有效工具。

### Pack Size

### Price

100 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 12,700.00
250 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 19,500.00
1mg	RMB 19,500.00

# 抗癌天然产物库 - 497个小分子

## Catalog No.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。

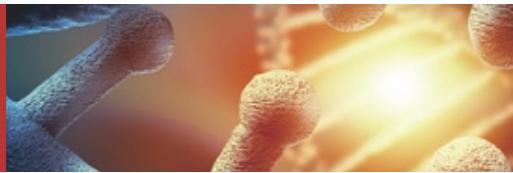
TargetMol® 精心筛选 497 种来源于植物、动物或微生物的具有已知或潜在抗肿瘤活性天然产物，性价比高，能够为您提供肿瘤药物开发、天然先导化合物筛选等研究的有力工具。

### Pack Size

### Price

100 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 68,720.00
250 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 115,047.00
1mg	RMB 115,047.00

## 新增化合物库



### 糖类及苷类化合物库 - 348个小分子 New

Catalog No.L1010

糖(saccharides)是多羟基醛或多羟基酮及其衍生物、聚合物的总称，无论是在植物还是动物中，糖的分布都极为广泛。糖类化合物多具有抗肿瘤活性(香菇多糖)或具有增强免疫功能(黄芪多糖)。

苷类(glycosides)是糖或糖的衍生物与另一非糖物质通过糖的端基碳原子连接而成的一类化合物，又称为配糖体。苷类的分布广泛，是普遍存在的天然产物。对于多数中草药，根及根茎往往是苷类分布的一个重要部位。苷类化合物多具有广泛的生物活性，如天麻甘是天麻安神镇静的主要活性成分；三七皂苷是三七活血化瘀的活性成分；强心苷具有强心作用；黄黄酮苷具有抗菌、止咳、平喘、扩张冠状动脉血管等作用。

陶术糖类及苷类化合物库收集了348种糖类或苷类的化合物，如人参皂苷、新橙皮苷、柴胡皂苷、红景天素等，可用于糖类药物的研发。

Pack Size	Price
100 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 51,550.00
250 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 85,930.00
1mg	RMB 85,930.00

### 藏药化合物库 - 239个小分子 New

Catalog No.L6210

藏药是在广泛吸收、融合了中医药学、印度医药学和大食医药学等理论的基础上，通过长期实践所形成的独特的医药体系，迄今已有上千年的历史，是中国较为完整、较有影响的民族药之一。青藏高原地域的辽阔和自然条件的复杂多变，决定了它丰富多彩的动植物资源。有史以来，藏区就是中国药用植物的一大宝库，据初步统计，野生药用植物资源有千种以上，其中冬虫夏草、贝母、三七、天麻、灵芝等为畅销国内外的名贵药材；海南粗榧、红豆杉、鬼臼、八角莲、软紫草、纤细雀梅藤、野百合等为一类有开发潜力的抗癌药用植物。此外，还有传统中药砂仁、钩藤、秦艽、丹皮、木瓜、重楼、麻黄、桃仁、黄连、柴胡、当归、黄芪、龙胆、党参、乌头、大黄、三颗针、雪莲花、五味子等各类药材。

源远流长的藏医药学博大精深，为方便科研人员研究藏药中有效成分的作用机理及进行相关的药物研发，我们收集了总共239种来源于数十种藏药的天然产物分子，来源包括冬虫夏草、红景天、藏红花、天山雪莲、灵芝等珍贵药材，可以用于高通量和高内涵筛选。

Pack Size	Price
100 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 35,420.00
250 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 59,000.00
1mg	RMB 59,000.00

# 抗COVID-19中药单体库 - 389个小分子 New

## Catalog No.L6720

作为中华民族的瑰宝，从古到今，中医药对中国人民的生命、健康都起到了保驾护航的作用。在新型冠状病毒肆虐之时，从抗击疫情一线也不断传来中医药治疗该病的好消息。

中医药通过临床筛选出有效的方剂“三药三方”，发挥了重要的作用。“三药”即连花清瘟胶囊、金花清感颗粒、血必净注射液，这三个药物都是前期经过审批的已经上市的老药。“三方”是指清肺排毒汤、化湿败毒方、宣肺败毒方三个方剂。

连花清瘟胶囊在治疗轻型、普通型患者方面显示出良好的疗效，在缓解发热、咳嗽、乏力等症状方面疗效明显。同时，可以有效的减轻转重率。血必净注射液可以促进炎症因子的消除，主要用于重型和危重型患者的早期和中期治疗，可以提高治愈率、出院率，减少重型向危重型方面的转化几率。金花清感颗粒是2009年在抗击甲型H1N1流感中研发出的有效的中药。金花清感颗粒对治疗新冠肺炎的轻型、普通型患者疗效确切，可以缩短发热的时间，不仅能够提高淋巴细胞、白细胞的复常率，而且可以改善相关的免疫学指标。

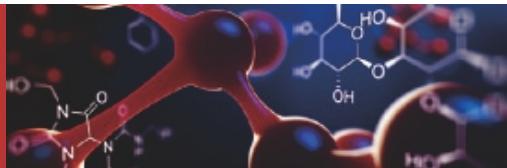
研究证明，这些传统中药方剂通过多成分、多靶标起到整体调节作用，参与到免疫、抗炎、内分泌、信号传导等生物学过程，抑制细菌内毒素产生，起到平衡免疫、消除炎症的作用，避免或缓解炎症风暴。为了进一步研究中药方剂在新冠病毒治疗的作用机理，我们特提取出389种活性单体，希望通过现代医学和药学知识来探求抑制新冠病毒的机制机理。

本库中收集了对新冠病毒有明显作用的方剂中包含的金银花、连翘、黄芩、柴胡、藿香、板蓝根、红景天等60种中草药来源的单体化合物，组建抗COVID-19中药单体库，含黄酮、生物碱、多酚、萜类等多种结构类型，为抗新冠病毒药物研发助力！如果您正在从事新冠病毒相关研究，对中药疗法感兴趣，欢迎与我们联系~

Pack Size	Price
100 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 57,330.00
250 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 95,560.00
1mg	RMB 95,560.00



# CADD化合物库



## 计算机辅助药物设计库 - 660万个小分子

### 产品描述

计算机辅助药物设计(Computer Aided Drug Design, CADD)在药物研发中具有非常重要的作用。高质量的小分子数据库不仅能极大的提升筛选效率,还能节省计算时间和购买费用。近些年来,国内外针对一些重大疾病药物靶标均有许多成功使用虚拟筛选的实例。在这些成功的实例中,多种不同类型的小分子化合物数据库(通常包括100,000~2000,000个化合物)被用于虚拟筛选,从中获得了生物活性达到 $\mu\text{M}$ 甚至nM级别的结构新颖的活性先导化合物。

陶术生物免费为广大计算机辅助药物设计的科学家提供660万个实体小分子化合物数据,这些数据包含了多样性类药化合物,五千种天然产物化合物单体和六千种上市药物、临床药物等活性小分子,99%以上都可以提供实体化合物,让您的新药研发项目可以在体内外活性测试水平上继续深入探索。

为了在结构多样性和产品特色的多样性上给科研工作者更多的帮助,陶术生物在CADD领域耕耘十余年,精心整合10个各具特色的知名品牌,拥有专业的服务和充分的经验,报价迅速,到货周期短,性价比高,为您提供最节省时间和经费的购买方案。

### 合作品牌

多样性类药化合物库、上市药物、临床期在研药物可供数据。



多样性类药化合物库、天然产物库、片段库扩展数据。



如下平台的产品均可快速提供。



## 产品特性

660万小分子，免费提供sdf格式电子数据，更新快捷，数据可靠；  
绝大部分小分子均有现货供应，确保筛到可买到；  
质控严格：随货附带HNMR或者LCMS谱图，符合药物筛选的纯度要求；  
报价快，到货周期短，性价比高，服务周到。

---

## 各品牌数据库特点

品牌名称	数量	特征
Targetmol	10,000	优势产品为已知活性化合物和天然产物，产品质量高，服务态度好，性价比高。
Chemdiv	1,540,000	全球最大的化合物品牌之一，拥有5000多种化合物骨架结构和100多种化合物库，性价比高。
Enamine	1,250,000	源自乌克兰的化合物品牌，具有较强的化合物研发能力，有高性价比化合物和高价值化合物两类产品。
Chembridge	700,000	源自美国的化合物品牌，总部位于圣地亚哥，拥有多样性库、大环库等多种热门化合物库。
Life Chemical	460,000	源自乌克兰的化合物品牌，拥有2900多种化合物骨架结构，化合物供应规格较齐全且均有对应价格。
Specs	210,000	源自荷兰的化合物品牌，价格优势明显。
Vitas-M	770,000	源自美国的化合物品牌，在香港拥有发货中心，到货速度快，价格适中。
InterBioScreen	558,000	源自俄罗斯的化合物品牌，拥有多种天然产物及衍生物。

---

## 主要虚拟筛选数据库

数据库名称	数量	特征
PPI CDI Library	210,000	最大的商业化蛋白相互作用库，可用于PPI相关的机制研究和调节剂筛选研究。
Sulfotransferase Library	89,000	89000种靶向磺基转移酶的潜在活性小分子，可用于磺基转移酶的相关研究。
Antiviral Library	80,000	80000种靶向多种病毒靶点的类药性小分子，是抗病毒药物筛选的必备工具。
Anticancer Library	65,000	65000种具有抗肿瘤潜力的类药性小分子，靶向多种肿瘤相关靶点。
Beyond the Flatland Library	100,000	10万种具有优良3D多样性的类药性小分子，是各类药物筛选的首选工具。
Na <sup>+</sup> Channels Blockers/Antagonists Set	58,000	58000种靶向Na离子通道的潜在活性小分子，是Na离子通道拮抗剂研究的有效工具。
New Agro Library	50,000	50000种农业相关的潜在活性小分子，可用于生长调节剂、除虫草剂等农业相关研究。
Smart Library	54,000	54000种靶点多样性的潜在活性小分子，适用于各类筛选目的和信号通路研究。
h-TERT Targeted Library	40,000	40000种靶向人源端粒酶逆转录酶的类药性小分子，适用于TERT的相关研究。
VEGFR-Inhibitors Library	43,000	43000种靶向VEGFR的潜在活性小分子，可用于VEGFR抑制剂的相关研究。
GPCR Target Platform Library	40,000	40000种靶向GPCR的类药性小分子，涵盖3600多种骨架结构。
Protein Kinases Inhibitors Library	38,000	38000种激酶靶向的潜在抑制剂小分子，可用于激酶的相关研究。
Fragments Library	13,000	13000种具有3D多样性的片段小分子，适用于FBDD的相关研究。
CNS Library	26,000	26000种CNS靶向的潜在活性小分子，适用于神经系统相关的药物研究。
Epigenetics Library	30,000	30000种表观遗传靶向的类药小分子合集，适用于表观遗传的相关研究。
Ion Channel Libraries	30,500	3万种离子通道靶向的类药性小分子，可用于离子通道相关研究。
Ro3 Fragment Library	69,500	近7万种基于Ro3原则收集的片段小分子，是FBDD研究的有力工具。
Polymerase Focused Library	17100	17000种靶向多聚酶的类药性小分子，是多聚酶相关研究的有效工具。
Glutamate Receptors	25000	25000种靶向谷氨酸受体的类药性小分子，是谷氨酸受体相关研究的有效工具。
General Fragment Library	38000	38000种片段小分子的集合，是FBDD筛选的有力工具
Nature compounds Library	68000	68000种天然产物及其衍生物，是各类药物筛选和研究的必备工具。

---

# HTS & HCS Compound Collection

高通量筛选,高内涵筛选(HTS, HCS)作为目前主流的药物筛选方法,具有微量、快速、灵敏和准确等优点,可同时筛选成千上万个样品。该技术一方面非常依赖数量庞大且结构多样性高的化合物库;另一方面,为了适应不同的研究可能性,潜在的靶点多样性也是非常重要的评估指标。

全球实体化合物约有5000万个,陶术只选择质量可靠,类药性佳,多样性好的化合物为客户提供实验样本。在化合物库的设计和筛选过程中,我们通过一系列方法,保证化合物库的多样化和高度特异性。这些库已经在我们的内部生物检测中得到了广泛的验证,并且在超过200个外部合作伙伴的实验室中得到验证,其中包括美国、欧洲和日本的制药、生物技术、学术和筛选中心。

目前,我们可提供约160万种供客户筛选的实体化合物,这些化合物以干粉、液体和薄膜的形式储存,可以帮助客户更快的筛选出有效的阳性化合物,值得注意的是,其中20%化合物是针对特定靶点,信号通路、细胞过程或疾病而设计,因此被称为CADD靶点库。这些化合物库是根据以下标准筛选:现有的靶点和配体信息、药物分子评价指标(结合最新设计趋势,包括先导类似物,Fsp3、可溶多样性、血脑屏障通透性,中型/大型和螺环化合物)、基础片段、氨基酸、B-γ螺旋、多肽和螺旋类似物、自噬、蛋白和蛋白相互作用调节等其他方面得到。同时,我们接受客户根据自身的特定筛选需求进行定制的服务,在很短的时间内即根据您的要求发货。这些产品一次可以为高通量筛选的平台提供数千个到数十万个小分子,每个产品的包装从100  $\mu\text{L} \times 10 \text{ mM}$  到50 mg不等,是陶术生物耕耘十年的核心领域,具有极强的专业经验和丰富的操作案例,如果您有建设高通量筛选化合物库平台的打算,欢迎随时和我们的技术支持联系。

为了使您的选择更加便捷,我们提供了从4131个到15万个不同梯度的化合物库方案供您选择。他们具有十分明显的优势:

- 2D和3D多样性更丰富;
- 分子复杂性更佳;
- 拥有更大的化学空间覆盖率;
- 更优良的药物化学性质参数(logP; PSA; 水溶解性等);
- 骨架结构的进一步修饰更为容易;
- 与天然产物具有更多的结构类似性;
- 更容易获得无专利的新化合物;
- 极强的重复供应能力和SAR类似物供应能力。

使用我们的多样性库是您项目的正确选择和良好起点,  
我们可提供的多样性库详情如下:

Catalog No.	产品名称	数量
L5600	Mini骨架库	5033
L5610	Golden骨架库	10000
D01200	药物靶点库	53180
D3100	Pre-多样性库	10W
DP9400	3D-Diversity Natural-Product-Like Library	21000
	多样性库	5W, 10W, 15W
	多样性库定制库	定制

# Mini骨架库 - 5033个小分子

Catalog No.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5033种化合物，可谓千里挑一，浓缩精华。为单个课题组量身设计，降低筛选门槛和筛选成本。

## 产品特性

多样性好，从一百多万个小分子中挑选而出，5033个化合物代表5033种骨架结构；  
类药性佳，所有化合物均经药化性质筛选过滤，剔除毒性、PAINS等不利结构；  
质控严格，化合物纯度均在90%以上，随货附带HNMR/LCMS谱图；  
可提供液体小包装，性价比更高。

## Pack Size

100 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 216,256.00
1 mg	RMB 348,447.00

# Golden骨架库 - 10000个小分子

Catalog No.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10000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。

## 产品特性

多样性好，从160万个小分子中挑选而出，10000个化合物，4131种骨架结构；  
类药性佳，所有化合物均经药化性质筛选过滤，剔除毒性、PAINS等不利结构；  
质控严格，化合物纯度均在90%以上，随货附带HNMR/LCMS谱图；  
可提供液体小包装，性价比更高；  
可与Mini骨架库组合购买，形成覆盖面更全的多样性骨架库。

## Pack Size

## Price

100 μL * 10 mM (in DMSO)	RMB 320,000.00
1 mg	RMB 400,000.00

# 药物靶点库 - 53180个小分子

## Catalog No. DO1200

基于靶点多样性概念构建,以文献报道的靶点结构和阳性小分子为原型,通过虚拟筛选和类似物富集等方式得到多个单一靶点集合,再进一步优化,得到53180个小分子。为各类筛选平台专业设计,适用多种HTS目的,实现一库多用。

### 产品特性

数量多,含53180种小分子化合物,是高通量筛选的有力工具;  
一库多用,涵盖300多个靶点,超过500个特定靶向化合物子库,适用于多种筛选目的;  
多样性好,超过1900种化合物骨架,600多种特有杂环结构,筛选概率和新颖性更高;  
药化性质优良,多重过滤筛选,每个子库仅含25-250种药化性质优良的化合物;  
纯度较高(不低于90%),随货附带HNMR/LCMS谱图符合药物筛选的纯度要求。

Pack Size	Price
100 μL * 10 mM (in DMSO) * 10000个小分子	待询
200 μL * 10 mM (in DMSO) * 10000个小分子	RMB 1,080,000.00
1 mg * 10000个小分子	RMB 1,080,000.00

# Pre-多样性库 - 10万个小分子

## Catalog No. D3100

基于靶点多样性和骨架多样性建立,精心挑选10万种小分子,在保证结构多样性的同时,覆盖CNS、GPCR、离子通道等多种靶点,适用于多种类型的筛选目的,是各大筛选平台HTS的首选工具。

### 产品特性

精心挑选10万种小分子化合物,是高通量筛选的首选工具,可提供液体小包装;  
骨架多样性好:包含4476种化合物骨架,12658种独特化合物,多样性系数高达0.8368;  
靶点多样性佳:涵盖抗肿瘤抗病毒相关的多种靶点,适用于不同靶点的多种筛选目的;  
类药性佳:所有化合物均经药化性质筛选过滤,剔除毒性、PAINS等不利结构;  
新鲜配置,品质保证:当年新鲜配置,最大程度避免反复冻融;  
重复供应能力强:所有化合物均有粉末库存,重复供应能力强;  
质控严格:随货附带HNMR/LCMS谱图,符合药物筛选的纯度要求。

# 多样性库 - 提供5W/10W/15W个小分子

充分考虑骨架结构多样性以及侧链和官能团多样性,以实现更合理的化学空间覆盖率。为关注结构多样性的客户量身定做,提供5W、10W和15W三种不同的数量规格,更多的数量对应的化学空间覆盖率也更为合理,是各类高通量筛选平台的优选工具。

## 产品特性

数量更灵活,提供5W、10W和15W三种数量规格,客户可根据需求选择特定数量;

储存条件严格,所有化合物均以粉末形式干燥低温储存;

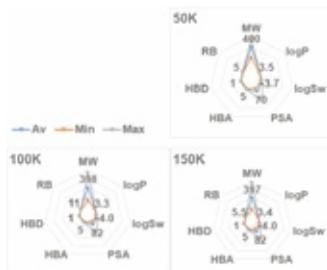
多样性好,超过4000种骨架结构,包含上千种独特杂环结构和数千种单一结构;

药活性佳:所有化合物均经药化性质筛选过滤,剔除毒性、PAINS等不利结构;

质控严格,化合物纯度均在90%以上,随货附带HNMR/LCMS谱图。

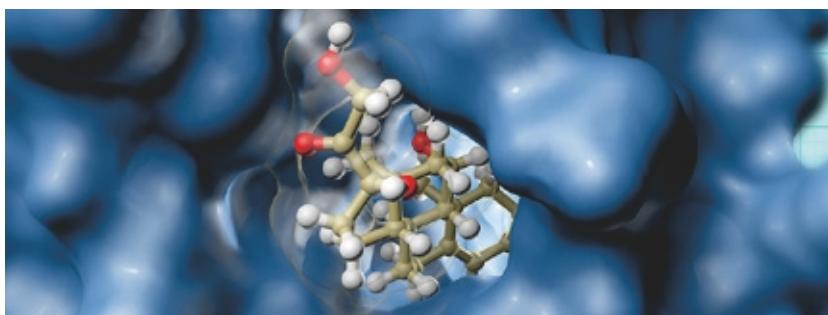
## 药化性质参数

## 结构多样性参数



独特杂环结构数	1245	1782	1969
多样性系数	0.85	0.83	0.83
骨架数	4213	5451	5451
单一结构数	11934	7875	17270

■ 50K ■ 100K ■ 150K



# 多样性定制库

我们每年定期增加五万到十万个新的化合物，这些化合物均来源于自主研发的、新型的，确定IP的化合物。我们始终期待按照您的个性化标准定制适合您特殊需要的多样性库。高度多样化的化合物使用“经典路线”合成，每个化合物的产量为100-150 mg，经过核磁和LCMS检测平均纯度高于92%。

如果您有药物作用靶点，但是没有化学背景，我愿意成为您的伙伴共同寻找先导化合物。

基于药物受体模型，我们可以从已有的化合物库中挑选出100-500个化合物的子集库，这些化合物具有一系列的药性和类先导化合物的特性。通常，根据客户的靶点，我们的团队需要数周生成10-25个以上的靶点库，或者立即从1.6M的库存化合物中筛选出相应的子集库。

## 产品特性

快速评估定制项目的可行性和周期；

从科学创新到成本控制多方面进行项目管理；

基于我们特有的母核设计您特有的化合物系列和子集库；

拥有丰富的样本库，多样性极佳，约有6,000个母核可供选择；

可以提供规模化合成、药合成、及靶点设计服务；

靶点相关性，药物类似性/先导类似性的计算机模拟和模型评估；

按照客户需求进行定制筛选；

包装灵活：20-500衍生物/母核，各种多孔板包装和灵活的运输能力/物流；

总计5,000种独有中间体；

不断更新和变化的关键中间体和母核；

供应能力从1mg到10kg；

可供定制的多孔板，溶液或者干膜；

根据客户的要求纯化样品；

可以提供纯化后的H-NMR, LC/MS 和HPLC (非标配, 可选)。

## 多样性定制库定制流程示意图



## 按疾病类型分类(计算机预测)

Catalog No.	产品名称	数量
DD2800	3D Mimetics PPI Library	2000
DD1900	Angiogenesis library	17000
DP2280	Anti-Aging Library	50000
DP2350	Antibacterial compounds library	15000
DD1100	Anticancer Library	65000
DD1700	Antifungal Library	18000
DD1500	Anti-HIV1 Library	21000
DD2300	Anti-infective Library	8765
DD1300	Anti-Inflammatory Library	28000
DD2200	Antimitotic Library	10000
DD1800	Antimitotic Tubulin Library	18000
DD1200	Antiparasite library	28000
DD2100	Antiviral HBV	11000
DD1000	Antiviral Library	80000
DD1600	Cancer Stem Cells Targeted Library	19000
DP2260	Cardiovascular Library	23000
DD2000	CNS BBB library	15000
DD1400	CNS Library	26000
DP2250	CNS MPO Library	30000
DD2500	CNS targets activity set	7000
DD2400	Immunological Library	7300
DD2700	Neuropeptide S Library	3000

## 按通路靶点分类(计算机预测)

Catalog No.	产品名称	数量
DP2400	Adenosine Receptors Targeted Library	21000
DP3200	Akt-Targeted Library	13650
DP2100	Allosteric Kinases Inhibitors Library	26000
DP3580	Alpha-Helix Mimetics Library	28000
DD2900	Androgen Receptor Antagonists Library	4,300
DP1200	Apoptotic Library	54000
DP4300	Aurora A-B Kinases Library	10000
DP2800	Autophagy-Targeted Library	19190
DD3000	BCL2 Targeted Library	8,786
DP2500	Beta 2 Adrenoligands Library	20000
DP5300	BRD4 targeted library	5000
DP3900	Calcium Channels Library	11000
DP4000	CXCR4-Targeted Library	11000
DP4200	Cyclin Ugi PPI Library	10582
DP5800	Developmental Pathway (Hh/Wnt) Set	2000
DP9200	DGK Inhibitors Library	12000
DP1600	DNMT-Focused Library	38000
DP3300	Eccentric PPI Library	13000
DP1900	Epigenetics Library	30431
DP2190	Epitranscriptome Focused Small Molecule Library	21,000
DP3400	G9a-Inhibitors Library	13000
DD3200	GABA Targeted Library	7,294
DP5100	Glucocorticoid receptors Library	5539
DP2600	GP-120 & GP-41 Libraries	20000
DP1500	GPCR Target Platform Library	40000
DP5400	GSK3 $\beta$ -Targeted Library	4991

## 按通路靶点分类(计算机预测)

Catalog No.	产品名称	数量
DP1300	h-TERT Targeted Library	49000
DP5500	HA2 Library	4000
DP2700	HDAC Library	20000
DP4100	Hedge Hog Pathway PPI Library	11000
DP3500	Hsp90-Targeted Library	13000
DO5000	Human GPCR Annotated Library	5,800
DO5100	Human Ion Channels Annotated Library	394
DO5200	Human Kinases Annotated Library	2,500
DO5400	Human Phosphatases Annotated Library	225
DO5300	Human Proteases Annotated Library	2,976
DO5500	Human Receptors Annotated Library	5,609
DO5600	Human Transcription Factors Annotated Library	5,278
DP5700	INTEGRIN Receptors Targeted library	2000
DP3000	Ion Channels Target Platform Library	15000
DP3800	KRAS-Targeted Library	11316
DP4700	Library of Small Molecule Inhibitors of beta-Catenin Signaling	8000
DP5600	Ligand-Gated Ion Channels Library	4000
DP7690	MDM2 focused Library	6500
DP2300	MDM2-p53 interaction inhibitors Library	22319
DP5000	MEF2-HDAC (class II) Modulators Library	6400
DP4800	Monoamine Transporters Library	8000
DP1100	Na <sup>+</sup> Channels Blockers/Antagonists Set	57500
DP2160	Neurotransmitter Transporter Inhibitors library	12,000
DP4500	NFkb-Regulators Library	9000
DP6000	NR-Focused Library	1700
DP4400	Nucleic acid ligands	9000
DP3600	P24-Targeted Library	12000
DP3100	Phosphatase Inhibitors	15000
DP2900	PI3K-Targeted Library	15683
DP5200	Polymerase Library	5500
DP1000	PPI CDI Library	14200
DP2200	PPI Helix Turn Mimetics Library	24000
DP1800	PRMT Library	31000
DP5900	Proline Kinase Library	2000
DP1700	Protein Kinases Target Platform Library	31000
DP2000	Recognition Elements PPI Library	27152
DD3300	RPTP Targeted Library	3,900
DP3700	SH2 Library	12000
DP4600	SH2 PTB Focused Library	8202
DD3600	STING Agonist Library	6,368
DP1400	Targeted Diversity Library	45429
DP4900	Type II Kinase Inhibitors Library	8000

## FBDD——片段库

近20年内,高通量筛选方法(high-throughput screening, HTS)成为药物发现的主导方法,许多制药公司也建立了含数百万小分子的化合物库,并发现了许多候选药物。然而在复杂靶点的药物筛选中,HTS却屡屡受挫,难以发现高潜力化合物。人们越来越意识到化学空间的巨大变化,显然上千万数量的化合物库也无法覆盖所有的化学空间结构。在这种背景下,基于片段的药物设计(Fragment-based drug design, FBDD)便应运而生。

FBDD的理论基础是挑选有利的片段组合或延伸得到新药物分子,获得高活性的候选药物。与HTS需要大规模化合物库相比,数千种片段分子即可组合出数百万种药物结构,更容易收集和管理,此外,片段的分子量更小,溶解度相对更高且更易进行结构优化,成药潜力更高。FBDD的本质并不是筛选已知化合物的类似物而是培育和设计药物。



比如蛋白相互作用等复杂靶点,其结合口袋较为平坦,化合物很难与之结合,HTS很难找到高效苗头化合物,FBDD则可先识别具有弱结合作用的小片段,以及能与多个位点同时结合的片段,再进一步优化结构,获得潜在成药化合物。通过这种方式目前已发现多个小分子,其中有30多个进入临床阶段,以及两个上市药物:Vemurafenib和Venetoclax。鉴于FBDD方法的成功运用,其在药物研发领域将会更受药物研发专家青睐。

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(未得到广泛认可),可旋转键数目不超过3,cLogP小于3。

陶术生物拥有多种高品质的片段库,全方位满足各类客户需求。

Catalog No.	产品名称	数量
L5700	精选片段库	246
L7800	高溶解性片段库	2746
L8800	药物片段库	1180
DF2000	3D片段库	4500
DF1000	片段库	15700

# 精选片段库 - 246个小分子

## Catalog No.L5700

在计算机筛选的基础上, 药化学家精心挑选246种片段小分子, 组成的精选片段库。该库规模较小, 适合各类FBDD研究使用。

### 产品特性

246个片段小分子的独特集合, 可用于基于片段的筛选和药物发现(FBDD);  
包含最具成药性能, 非常适合筛选和改造的38个精选片段;  
所有产品现货供应, 固态存储, 避免变质; 可提供DMSO液体包装, 直接筛选;  
可提供基于筛选片段的衍生物以及定制合成服务, 降低您的合成成本, 缩短研发时间

Parameter	Range	Average
MW	148 to 408	221
HBA	1 to 7	3
HBD	0 to 4	1.2
LogP	< 4.2	1.1
RotB	0 to 8	2.5

# 高溶解性片段库 - 2746个小分子

## Catalog No.L7800

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, 不仅如此, 我们的每一个片段都在DMSO与PBS中测试过溶解度, 确保化合物具有良好的溶解性。

片段库Plus包含2746种片段, 数量适中, 非常适用于FBDD方法使用, 是极为实用的新药筛选工具。

### 产品特性

数量:2746种片段分子合集, 数量适中, 是FBDD方法新药筛选的必备工具。

药化性质:依据Fragment的RO3原则构建, 具有优良的药化性质, 便于后续结构优化。

多样性:药效团丰富, 极大的覆盖了可能的空间结构。每一个分子在设计之初的时候均考虑了结构的多样性和新颖性。

溶解度:保证在DMSO和PBS buffer中的溶解度:DMSO (200 mM), PBS (1 mM)。

适用方法多样:适合SPR, 核磁, X射线单晶衍射等多种检测手段进行新药开发。

# 药物片段库 - 1180个小分子

## Catalog No.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2080种上市药物和1100种临床期药物进行片段化处理和层层筛选, 构建了一个由1180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。

# 3D片段库 - 4500个小分子

## Catalog No.DF2000

许多科学家认为丰富的3D结构多样性可以大大改善当前片段库的化学空间覆盖率和质量,从而增加FBDD方法的适用范围。3D片段库在二维结构的基础上,考虑化合物库三维性(Fsp3参数),收集4500种片段小分子构建而成。3D片段库具有较多的片段结构,适用于FBDD相关的药物研发。

### 产品特性

数量:包含4400种以上的片段结构,是FBDD方法新药筛选的实用工具;  
多样性:充分考虑空间结构多样性,多样性系数为0.9,具有极佳的多样性;  
超过1100种化合物符合RO3原则;  
至少有2850种片段包含一个以上的手性中心;  
有200个以上的桥连接片段,450个以上的螺旋片段。

# 片段库 - 15000个小分子

## Catalog No.DF1000

综合考虑RO3原则、3D结构、新颖性与多样性等因素,收集15000多种片段小分子构建成具有一定规模的片段库,包含3D片段库的片段。客户可根据自身需求挑选特定的片段结构。

### 产品特性

数量:包含15700种片段结构,富含sp3的片段超过4500个;  
多样性:多样性系数高达0.9,多样性极佳;  
符合RO3原则的片段超过6400个;  
至少有2850种片段包含一个以上的手性中心;  
有200个以上的桥连接片段,450个以上的螺旋片段。

## 特色类药性化合物库

Catalog No.	产品名称	数量
DO1100	AgroChemical Library	55000
DO1000	Beyond the Flatland Library	65000
DO2000	Bromodomains Library	6912
DP2390	ChemoGenomic Annotated library for Phenotypic Screening	99000
DO1400	Chemokines Library	20000
DO2200	Covalent inhibitors Library	5600
DP9700	Dark Chemical Matter Library	25000
DP9200	DGK Inhibitors Library	12000
DO2300	Frequent Hitters Library	4950
DO2100	Indoleamine 2,3-dioxygenase 1 focused library	6655
DO2400	Macrocycles Library	3300
DO1900	Matrix Metalloproteinases Targeted Library	9000
DD3500	Nucleoside Mimetics Library	2503
DO1600	Peptidomimetic Library	13000
DO2500	Peptidomimetics of Beta-Turn Motifs Library	2679
DD3400	Purine Based Nucleoside Library	1257
DD3100	Regenerative Medicine Focused Library	23000
DP1890	Selective Target Activity Profiling library	18000
DO1800	Shape Helix Mimetics PPI Library	9454
DO1700	Soluble Diversity Library	9500
DO1500	Spiro-library	19000
DO1300	Target Identification, Phenotypic Screening library (TIPS)	35000
DP2360	Therapeutic Diversity Annotated Library	2000

# Application

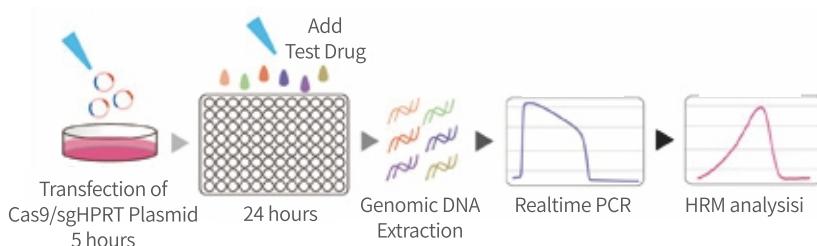
## TargetMol化合物库应用实例

### 上市药物库——药物功能重定位

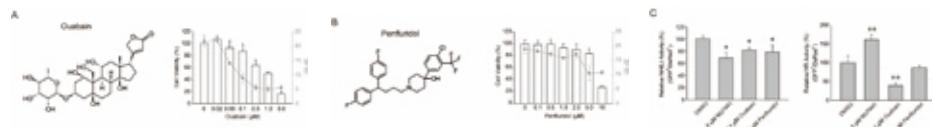
A CRISPR/Cas9-based screening for non-homologous end joining inhibitors reveals ouabain and penfluridol as radiosensitizers

Du J, Shang J, Chen F, et al. Mol Cancer Ther. 2018 Feb;17(2):419-431.

利用基因编辑系统CRISPR/Cas9及高分辨率熔解技术(HRM),构建筛选NHEJ活性抑制剂的模型,随后采用美国TargetMol<sup>®</sup>上市药物库中的1540种化合物,筛选NHEJ活性抑制剂。



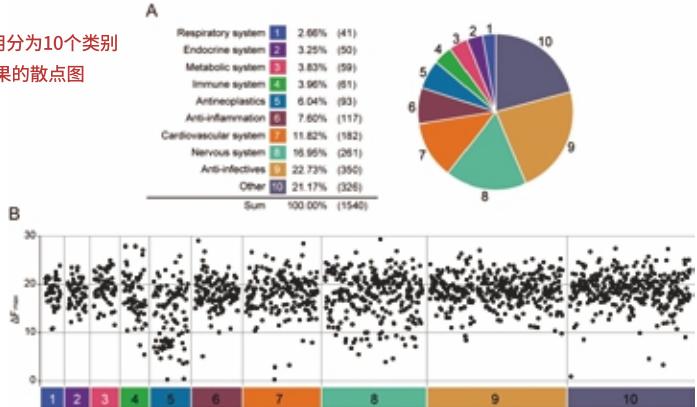
### 筛选方法



Ouabain(A)和Penfluridol(B)以剂量依赖方式抑制细胞活性和NHEJ

A.上市药物根据药理作用分为10个类别

B.1540种化合物筛选结果的散点图

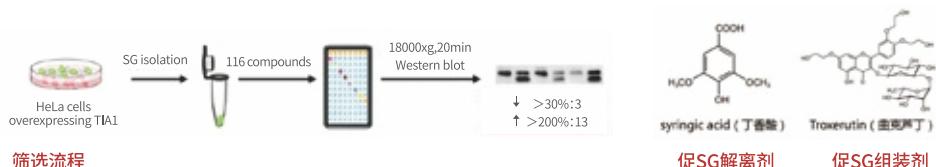


## 天然产物库——筛选小分子调节剂

Screening novel stress granule regulators from a natural compound library

Hu L D, Chen X J, Liao X Y, et al. Protein & cell, 2017, 8(8): 618-622.

采用美国TargetMol® 精选天然产物库中的116种化合物筛选特异性的应力颗粒(stress granule, SG) 调节剂, 这些化合物来源于58种中国传统医用植物, 涵盖了生物碱, 糖苷, 酮, 类黄酮, 苯丙素类, 酚类, 醌类, 蒽类化合物和类固醇的化合物。

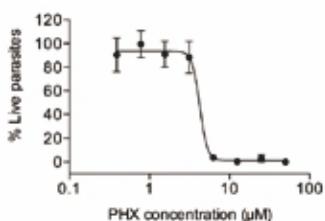


## 临床药物库——药物功能重定位

Discovery and Characterization of Novel Anti-schistosomal Properties of the Anti-anginal Drug, Perhexiline and Its Impact on Schistosoma mansoni Male and Female Reproductive Systems

Alessandra G, Cristiana L, Emerald P, et al. Plos Negl Trop Dis, 2016, 10 (8):e0004928.

采用美国TargetMol® 临床药物库中432种化合物筛选新型抗血吸虫药, 并研究筛选得到的药物Perhexiline (PHX) 对雌性和雄性曼氏血吸虫生殖系统的影响。

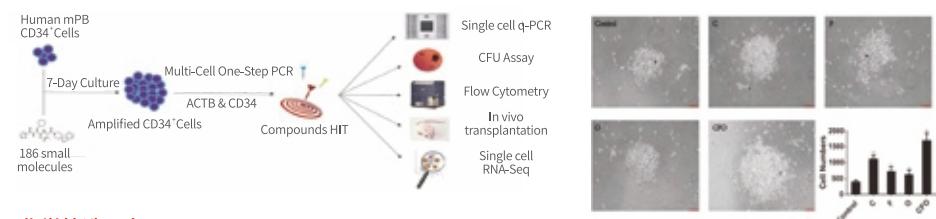


PHX处理后曼氏血吸虫的存活率

## 干细胞库——细胞维持

Maintenance of human haematopoietic stem and progenitor cells in vitro using a chemical cocktail Alessandra Jiang M , Chen H , Lai S , et al. Cell Discovery(2018) , 4(1).

采用美国TargetMol® 干细胞库中的化合物体外筛选能够维持人CD34阳性细胞的化合物, 发现CHIR-99021 (C)、Forskolin (F) 和OAC1 (O) 的组合 (CFO) 通过激活HOXA9、GATA2和AKT-cAMP信号通路能够有效维持人CD34阳性细胞。



化学筛选平台

不同样品处理后的细胞形态和数目





## 活性化合物库

包含10000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10000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660万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, 并可针对性提供溶解度极佳的片段, DMSO中溶解度大于200mM, PBS中溶解度大于1mM。



✉ info@tsbiochem.com

🌐 www.tsbiochem.com

📞 400 - 821 - 2233

📍 上海市静安区江场三路228号

---

陶术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。