

陶术生物技术服务目录

Topscience Technical Service Catalog



☎ 400-821-2233
☎ 021-34692979
📍 上海市静安区江场三路228号
✉ info@tsbiochem.com
🌐 www.tsbiochem.com



关于我们

About US

陶术生物是一家致力于服务全球研发工作者的高新技术企业，深耕化合物筛选领域十余年，旗下 TOPSCIENCE（陶术）品牌立足于多年积累的专家资源，与全球千余家知名高校和科研院所的优秀学者建立了紧密的合作关系。

我们可为客户提供涵盖各种靶标和疾病领域的化合物筛选服务，包括基于靶点的药物活性筛选（如酶学靶点、GPCR 靶点、离子通道靶点、核受体靶点等）、抗肿瘤药物体外筛选、药物作用机理研究、计算机虚拟筛选等 500 多种技术服务项目。凭借经验丰富的技术团队、先进一流的仪器设备、严谨全面的方案制定，陶术致力于打造模型丰富、结果可信的药物筛选平台，力求为全球药物研发机构提供优质高效的技术服务。



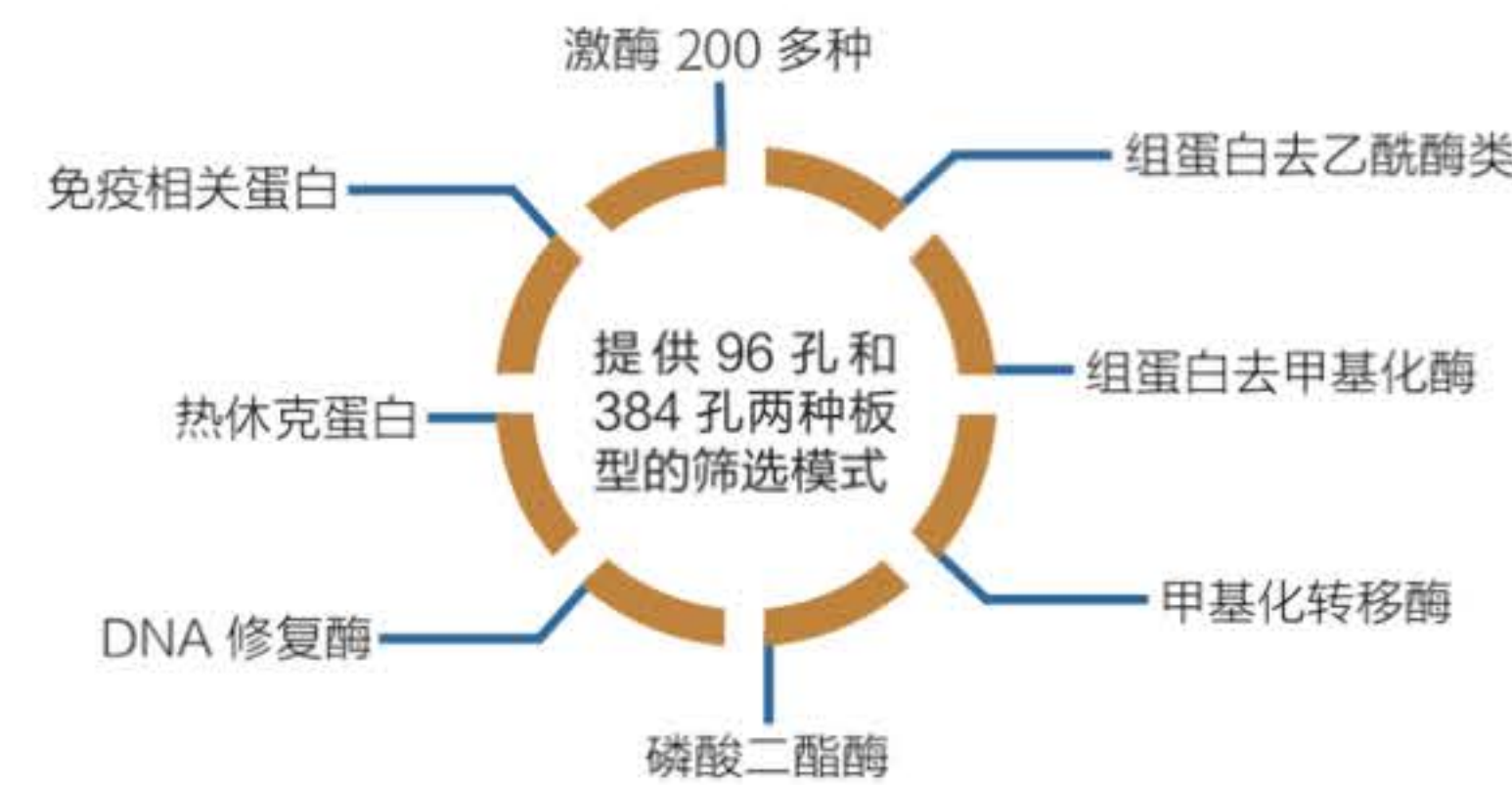
目录

Contents

酶学靶点筛选	01
抗肿瘤药物体外筛选	16
体外模型开发与验证	17
药物作用机理实验	19
计算机辅助药物设计	19
虚拟筛选化合物库	24
常见问题解答	26

酶学靶点筛选

酶学研究一直是药物研发的重要组成部分。陶术生物拥有丰富的酶学筛选经验如激酶谱筛选等，酶学实验涵盖 600 多种筛选模型，包括了常见的组蛋白去乙酰化酶类，组蛋白去甲基化酶，络氨酸激酶，丝氨酸激酶，甲基化转移酶，磷酸二酯酶，DNA 修复酶，热休克蛋白，免疫相关蛋白等。根据化合物数量的多少可提供灵活的项目实施计划，可提供 96 孔和 384 孔两种板型的筛选模式，加速您的药物研发进程。

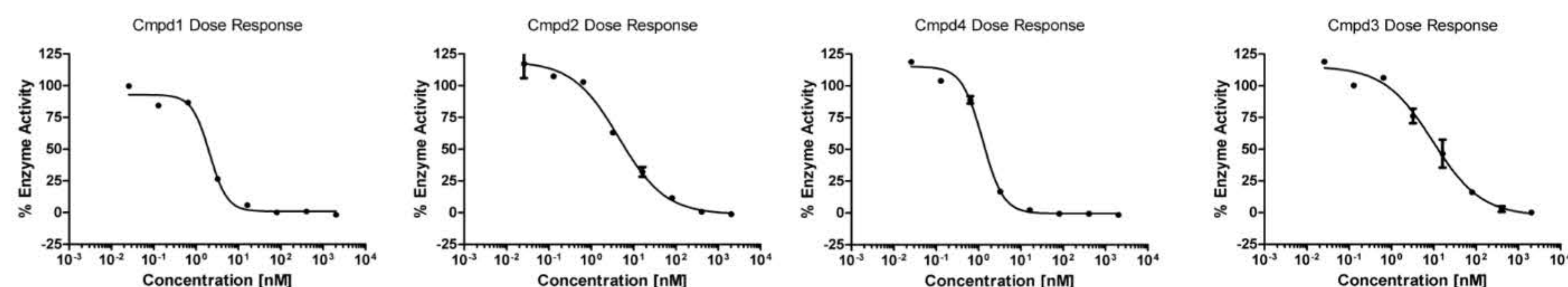


激酶谱筛选

十年前当人类基因组刚刚发布的时候，在成千上万的蛋白库中理论预测可能为激酶的蛋白大概 500 种。在已公认的药物靶点中，蛋白激酶已成为药物发现领域中第二类药物筛选靶点。激酶包括蛋白激酶、磷酸酶和磷酸酯酶。蛋白激酶是通过共价调节的方式将磷酸基团转移到其他蛋白上发挥功能的，它们是激酶药筛靶点分子中的最大一类。蛋白激酶表达或功能失控可能会导致癌症和其他疾病。磷酸酶和磷酸酯酶则是信号转导通路中的关键调控因子，在癌症、神经退化、糖尿病和其他疾病中它们的调控都是紊乱的。陶术生物在激酶谱的药物筛选、发现与开发上有着丰富的经验，我们可以提供从检测方法开发、高通量筛选到选择性分析等一系列激酶研究解决方案。

酶类靶点筛选的主要检测方法

生化检测分析：ADP-Glo 检测，Fluorescence 荧光检测法，Absorbance 光吸收检测，TR-FRET（共振能量转移）时间分辨荧光共振能量转移，Chemiluminiscence 化学发光检测等。



Deacetylases

靶点	板型	试剂盒名称	阳性化合物
HDAC	96-well plate	HDAC Fluorogenic Assay Kit	Trichostatin A (TSA)
HDAC1	96-well plate	HDAC1 Fluorogenic Assay Kit	Trichostatin A (TSA)
HDAC2	96-well plate	HDAC2 Fluorogenic Assay Kit	Trichostatin A (TSA)
HDAC3	96-well plate	HDAC3 Fluorogenic Assay Kit	Trichostatin A (TSA)
HDAC4	96-well plate	HDAC4 Fluorogenic Assay Kit	Trichostatin A (TSA)
HDAC5	96-well plate	HDAC5 Fluorogenic Assay Kit	Trichostatin A (TSA)
HDAC6	96-well plate	HDAC6 Fluorogenic Assay Kit	Trichostatin A (TSA)
HDAC7	96-well plate	HDAC7 Fluorogenic Assay Kit	Trichostatin A (TSA)
HDAC8	96-well plate	HDAC8 Fluorogenic Assay Kit	Trichostatin A (TSA)
HDAC9	96-well plate	HDAC9 Fluorogenic Assay Kit	Trichostatin A (TSA)
HDAC11	96-well plate	HDAC11 Fluorogenic Assay Kit	-
SIRT1	96-well plate	SIRT1 (Sirtuin1) Fluorogenic Assay Kit	Ncotinamide
SIRT2	32 reactions	SIRT2 (Sirtuin2) Fluorogenic Assay Kit	Ncotinamide
SIRT3	32 reactions	SIRT3 (Sirtuin3) Fluorogenic Assay Kit	Ncotinamide
SIRT5	96-well plate	SIRT5 (Sirtuin5) Fluorogenic Assay Kit	Ncotinamide
SIRT6	96-well plate	Sirtuin 6 Fluorogenic Assay Kit	Ncotinamide
SIRT7	96-well plate	ADP-Glo	-
	384 reactions	ADP-Glo	-

Demethylases

靶点	板型	试剂盒名称	阳性化合物
FBXL10	96-well plate	FBXL10 (KDM2B) Chemiluminescent Assay Kit	2-4-pyridinedicarboxylic acid (2,4-PC)
FBXL11	384 reactions	FBXL11 (KDM2A) Homogeneous Assay Kit	2-4-pyridinedicarboxylic acid (2,4-PC)
JARID1A (KDM5A)	96-well plate	JARID1A (KDM5A) Chemiluminescent Assay Kit	GSK-J1
	384 reactions	JARID1A (KDM5A) Homogeneous Assay Kit	GSK-J1
JARID1B	96-well plate	JARID1B (KDM5B) Chemiluminescent Assay Kit	KDOAM25
	384 reactions	JARID1B (KDM5B) Homogeneous Assay Kit	KDOAM25

Demethylases

靶点	板型	试剂盒名称	阳性化合物
JARID1C (KDM5C)	384 reactions	JARID1C (KDM5C) Homogeneous Assay Kit	N-oxalylglycine
JHDM1D (KDM7A)	96-well plate	JHDM1D (KDM7A) Chemiluminescent Assay Kit	2-4-pyridinedicarboxylic acid (2,4-PC)
	384 reactions	JHDM1D (KDM7A) Homogeneous Assay Kit	JIB-04
JMJD1A	96-well plate	JMJD1A Homogeneous Assay Kit	-
JMJD1A (KDM3A)	384 reactions	JMJD1A (KDM3A) Homogeneous Assay Kit	JIB-04
LSD1 (KDM1A)	96-well plate-Fluorescent	LSD1 (KDM1A) Fluorescent Assay Kit	-
	384-well plate-Fluorescent	LSD1 (KDM1A) Fluorescent Assay Kit	-
	384-well plate-Homogeneous	LSD1 (KDM1A) Homogeneous Assay Kit	GSK-LSD1
	96-well plate- Chemiluminescent	LSD1 (KDM1A) Chemiluminescent Assay Kit	-
JMJD2A (KDM4A)	384-well plate	JMJD2A (KDM4A) Homogeneous Assay Kit	2-4-pyridinedicarboxylic acid (2,4-PC)
JMJD2B (KDM4B)	384-well plate	JMJD2B (KDM4B) Homogeneous Assay Kit	2-4-pyridinedicarboxylic acid (2,4-PC)
JMJD2C (KDM4C)	384-well plate	JMJD2C (KDM4C) Homogeneous Assay Kit	2-4-pyridinedicarboxylic acid (2,4-PC)
	96-well plate	JMJD2C (KDM4C) Chemiluminescent Assay Kit	JMJD 2C
JMJD2A (KDM4A)	96-well plate	JMJD2D (KDM4D) Chemiluminescent Assay Kit	2-4-pyridinedicarboxylic acid (2,4-PC)
JMJD2E (KDM4DL)	384-well plate	JMJD2E (KDM4DL) Homogeneous Assay Kit	JMJD2E/KDM4L
JMJD3 (KDM6B)	384 reactions	JMJD3 (KDM6B) Homogeneous Assay Kit	GSK-J1
	96 reactions (8well plate)	JMJD3 (KDM6B) Chemiluminescent Assay Kit	GSK-J1
PHF8 (KDM7B)	384 reactions	PHF8 (KDM7B) Homogeneous Assay Kit	JIB-04
TET1	96-well plate	TET1 Chemiluminescent Assay Kit	2-4-pyridinedicarboxylic acid (2,4-PC)
TET2	96-well plate	TET2 Chemiluminescent Assay Kit	2-4-pyridinedicarboxylic acid (2,4-PC)
UTX	96-well plate	UTX Chemiluminescent Assay Kit	GSK-J1

Methyltransferases

靶点	板型	试剂盒名称	阳性化合物
DNMT	96-well plate	DNMT Universal Chemiluminescent Assay Kit	DNMT3B/3L
DNMT1	96-well plate	DNMT1 Chemiluminescent Assay Kit	-
DNMT3A	96-well plate	DNMT3A Chemiluminescent Assay Kit	-

Methyltransferases

靶点	板型	试剂盒名称	阳性化合物
DNMT3B	96-well plate	DNMT3B Chemiluminescent Assay Kit	DNMT3B/3L
DOT1L (KMT4)	96-well plate	DOT1L (KMT4) Chemiluminescent Assay Kit	SGC0946
EHMT1/GLP	96-well plate	EHMT1/GLP Chemiluminescent Assay Kit	AdoHCys
EZH1	384 reactions	EZH1 Chemiluminescent Assay Kit	-
	96-well plate	EZH1 Chemiluminescent Assay Kit	-
EZH2 (A677G)	384 reactions	EZH2 (A677G) Chemiluminescent Assay Kit	GSK343
	96 reactions	EZH2 (A677G) Chemiluminescent Assay Kit	-
EZH2 (Y641F)	384 reactions	EZH2(Y641F) TR-FRET Assay Kit	GSK126
	384 reactions	EZH2 (Y641N) TR-FRET Assay Kit	-
EZH2 (Y641N)	96 reactions	EZH2 (Y641N) Chemiluminescent Assay Kit	GSK343
	384 reactions	EZH2 (Y641N) Chemiluminescent Assay Kit	GSK343
G9a	384 reactions	G9a Homogeneous Assay Kit	UNC0646
	96 reactions	G9a Chemiluminescent Assay Kit	-
Histone H3(K9)	96-well plate	Histone H3(K9) Universal Methyltransferase New Assay Kit	-
Histone H4(R3)	96-well plate	Histone H4(R3) Methyltransferase Assay Kit	-
MLL1	96-well plate	MLL1 Complex Chemiluminescent Assay Kit	-
NSD1	96-well plate	NSD1 Chemiluminescent Assay Kit	-
NSD2	384-well plate	NSD2 Chemiluminescent Assay Kit	Chaetocin
	96-well plate	NSD2 Chemiluminescent Assay Kit	Chaetocin
PRMT1	96 reactions	PRMT1 Chemiluminescent Assay Kit	-
	384 reactions	PRMT1 Homogeneous Assay Kit	MS023
PRMT3	96-well plate	PRMT3 Chemiluminescent Assay Kit	-
	384 reactions	PRMT3 Homogeneous Assay Kit	SGC707
PRMT4	384 reactions	PRMT4 Homogeneous Assay Kit	MS023
	96 reactions (8well plate)	PRMT4 Chemiluminescent Assay Kit	-
PRMT5	384 reactions	PRMT5 TR-FRET Assay Kit	EPZ015666
	384-well plate	PRMT5 Chemiluminescent Assay Kit	EPZ015666

Methyltransferases

靶点	板型	试剂盒名称	阳性化合物
PRMT5	96-well plate	PRMT5 TR-FRET Assay Kit	EPZ015666
	384 reactions	PRMT5 Homogeneous Assay Kit	EPZ015666
PRMT8	96-well plate	PRMT8 Chemiluminescent Assay Kit	MS023
	384-well plate	PRMT8 Homogeneous Assay Kit	MS023
SETD2	96-well plate	SETD2 Chemiluminescent Assay Kit	AdoHcy
SetDB1	96 reactions	SetDB1 Chemiluminescent Assay Kit	S-Adenosylhomocysteine
SUV39H1	96 reactions (8well plate)	SUV39H1 Chemiluminescent Assay Kit	-
SUV39H2	96-well plate	SUV39H2 Activity Assay Kit	-
SUV4-20H1	96-well plate	SUV4-20H1 Chemiluminescent Assay Kit	-
EZH2 (A738T)	384 reactions	EZH2 (A738T) Chemiluminescent Assay Kit	GSK343
	96 reactions	EZH2 (A738T) Chemiluminescent Assay Kit	GSK343
NSD3	384-well plate	NSD3 Chemiluminescent Assay Kit	Chaetocin
	96-well plate	NSD3 Chemiluminescent Assay Kit	Chaetocin
PRMT6	384 reactions	PRMT6 (HRMT1L6) Homogeneous Assay Kit	MS023
	96-well plate	PRMT6 (HRMT1L6) Chemiluminescent Assay Kit	-
PRMT9	384 reactions	PRMT9 Homogeneous Assay Kit	S-Adenosylhomocysteine
SMYD2	96-well plate	SMYD2 (KMT3C) Chemiluminescent Assay Kit	LLY507
SMYD3	384 reactions	SMYD3 Homogeneous Assay Kit	-
SMYD4	96-well plate	SMYD4 Chemiluminescent Assay Kit	Chaetocin
SET7/9	96 wells	SET7/9 Methyltransferase Inhibitor Screening Assay Kit	-
SET8	96-well plate	SET8 Methyltransferase Inhibitor Screening Assay Kit	-

Phosphodiesterase

靶点	板型	试剂盒名称	阳性化合物
PDE10A	96-well plate	PDE10A Assay Kit	Papaverine
PDE10A1	384-well plate	PDE10A1 Assay Kit	Papaverine

Phosphodiesterase

靶点	板型	试剂盒名称	阳性化合物
PDE10A1	96-well plate	PDE10A1 TR-FRET Assay Kit	Papaverine
PDE10A2	96-well plate	PDE10A2 TR-FRET Assay Kit	Papaverine
PDE11A	96-well plate	PDE11A Assay Kit	Dipyridamole
PDE1A	96-well plate	PDE1A Assay Kit	Bay 60-7550
PDE1B	96-well plate	PDE1B TR-FRET Assay Kit	Bay60-7550
	96-well plate	PDE1B Assay Kit	Bay60-7550
PDE1C	96 reactions (8well plate)	PDE1C Assay Kit	Bay60-7550
	96-well plate	PDE1C Assay Kit	Bay60-7550
	96-well plate	PDE1C TR-FRET Assay Kit	Bay60-7550
	96-well plate	PDE1C Mouse Assay Kit	Bay60-7550
PDE2A	384-well plate	PDE2A Assay Kit	Bay60-7550
	96-well plate	PDE2A Assay Kit	Bay60-7550
PDE3A	96-well plate	PDE3A Assay Kit	Cilostamide
	96-well plate	PDE3A TR-FRET Assay Kit	Cilostamide
PDE3B	96-well plate (384 reactions)	PDE3B Assay Kit	Cilostamide
	96-well plate	PDE3B Assay Kit	Cilostamide
PDE4A1A	96-well plate	PDE4A1A Assay Kit	Apremilast
PDE4B1	96-well plate	PDE4B1 Assay Kit	Apremilast
PDE1A	96-well plate	PDE4B2 Assay Kit	Apremilast
PDE4D2	96-well plate	PDE4D2 TR-FRET Assay Kit	Rolipram
	96-well plate	PDE4D2 Assay Kit	Apremilast
PDE4D3	96-well plate	PDE4D3 TR-FRET Assay Kit	Rolipram
	96-well plate	PDE4D3 Assay Kit	Apremilast
PDE4D7	96-well plate	PDE4D7 TR-FRET Assay Kit	Apremilast
PDE5A1	384-well plate	PDE5A1 Assay Kit	Sildenafil Citrate
	96-well plate	PDE5A1 Assay Kit	Sildenafil Citrate
PDE7A	384-well plate	PDE7A Assay Kit	BRL-50481
	96-well plate	PDE7A Assay Kit	BRL-50481

Phosphodiesterase

靶点	板型	试剂盒名称	阳性化合物
PDE7B	96-well plate	PDE7B Assay Kit	Dipyridamole
PDE8A	96-well plate	PDE8A Assay Kit	Dipyridamole
PDE9A	96-well plate	PDE9A Assay Kit	Bay 73-6691
PDE4C	384-well plate	PDE4C Assay Kit	Apremilast
Autotaxin	96-Well	Autotaxin Inhibitor Screening Assay Kit	-

PARPs

靶点	板型	试剂盒名称	阳性化合物
PARP1	96-well plate	PARP1 Chemiluminescent Assay Kit	-
	384-well plate	PARP1 Chemiluminescent Assay Kit (384-well)	AZD2281
	96-well plate	PARP1 Colorimetric Assay Kit	AZD2281
PARP2	96-well plate	PARP2 Colorimetric Assay Kit	AZD2281
	384-well plate	PARP2 Homogeneous Assay Kit	-
	96-well plate	PARP2 Chemiluminescent Assay Kit	-
PARP3	96-well plate	PARP3 Chemiluminescent Assay Kit	-
PARP6	32 reactions	PARP6 Chemiluminescent Assay Kit	AZD2281
PARP7	96-well plate	PARP7 (TIPARP) Chemiluminescent Assay Kit	AZD2281
PARP10	96-well plate	PARP10 Chemiluminescent Assay Kit	AZD2281
PARP11	96-well plate	PARP11 Chemiluminescent Assay Kit	-
PARP14	32 reactions	PARP14 Chemiluminescent Assay Kit	-
PARP15	8-well plate (96 reactions)	PARP15 Chemiluminescent Assay Kit	AZD2281
TNKS1	96-well plate	TNKS1 Histone Ribosylation Colorimetric Assay Kit	-
	96-well plate	TNKS1 Histone Ribosylation Assay Kit (Biotin-labeled NAD+)	XAV939
	8-well plate (96 reactions)	TNKS1 Histone Ribosylation Assay Kit (Antibody Detection)	XAV939
	384-well plate	TNKS1 Histone Ribosylation Assay Kit (Antibody Detection)	XAV939
	384-well plate	TNKS1 Histone Ribosylation Assay Kit (Biotin-labeled NAD+)	XAV939

PARPs

靶点	板型	试剂盒名称	阳性化合物
TNKS2	96-well plate	TNKS2 Histone Ribosylation Colorimetric Assay Kit	XAV939
	384-well plate	TNKS2 Histone Ribosylation Assay Kit (Biotin-labeled NAD+)	XAV939
	8-well plate (96 reactions)	TNKS2 Histone Ribosylation Assay Kit (Antibody Detection)	XAV939
	384-well plate	TNKS2 Histone Ribosylation Assay Kit (Antibody Detection)	XAV939
	96-well plate	TNKS2 Histone Ribosylation Assay Kit (Biotin-labeled NAD+)	XAV939

Protease

靶点	板型	试剂盒名称	阳性化合物
DPP3	96-well plate	DPP3 Assay Kit	-
DPP4	96-well plate	DPP4 Assay Kit	-
DPP7	96-well plate	DPP7 Assay Kit	-
DPP8	96-well plate	DPP8 Assay Kit	-
DPP9	96-well plate	DPP9 Assay Kit	-
FAP	96-well plate	FAP Assay Kit	-
POP	96-well plate	POP Assay Kit	-
Renin	96-well plate	Renin Assay Kit	Aliskiren
Caspase-3	96-well plate	Caspase-3 Homogeneous Assay Kit	XIAP 或 Ac-DNLD-CHO
Caspase-6	96-well plate	Caspase-6 Homogeneous Assay Kit	Ac-IETD-CHO
Caspase-7	96-well plate	Caspase-7 Homogeneous Assay Kit	XIAP 或 Ac-DNLD-CHO
Caspase-8	96-well plate	Caspase-8 Homogeneous Assay Kit	Ac-IETD-CHO

Bromodomains

靶点	板型	试剂盒名称	阳性化合物
ATAD2A	384 reactions	ATAD2A TR-FRET Assay Kit	-
	384 reactions	ATAD2A Inhibitor Screening Assay Kit	-

Bromodomains

靶点	板型	试剂盒名称	阳性化合物
ATAD2B	384 reactions	ATAD2B TR-FRET Assay Kit	-
	384 reactions	ATAD2B Inhibitor Screening Assay Kit	-
BAZ2B	384 reactions	BAZ2B Inhibitor Screening Assay Kit	AZD2281
BPTF/FALZ	384 reactions	BPTF/FALZ TR-FRET Assay Kit	AZD2281
BRD1	384 reactions	BRD1 Inhibitor Screening Assay Kit	-
	384 reactions	BRD1 TR-FRET Assay Kit	-
BRD2	384 reactions	BRD2 (BD1+BD2) TR-FRET Assay Kit	-
	384 reactions	BRD2 (BD2) Inhibitor Screening Assay Kit	JQ1
BRD3	384 reactions	BRD3 (BD1+BD2) TR-FRET Assay Kit	JQ1
	384 reactions	BRD3 (BD1) Inhibitor Screening Assay Kit	JQ1
	384 reactions	BRD3 (BD2) Inhibitor Screening Assay Kit	JQ1
BRD4	384 reactions	BRD4 (BD2) TR-FRET Assay Kit	JQ1
	384 reactions	BRD4 (BD1) TR-FRET Assay Kit	JQ1
	384 reactions	BRD4 (BD1+BD2) TR-FRET Assay Kit	JQ1
BRD4	384 reactions	BRD4 (BD1) Inhibitor Screening Assay Kit	JQ1
	384 reactions	BRD4 (BD2) Inhibitor Screening Assay Kit	JQ1
	384 reactions	BRD4 (BD1+BD2) TR-FRET Assay Kit	JQ1
BRD9	384 reactions	BRD9 TR-FRET Assay Kit	-
	384 reactions	BRD9 (BD1) Inhibitor Screening Assay Kit	-
BRDT	384 reactions	BRDT (BD1+BD2) TR-FRET Assay Kit	JQ1
BRPF3	384 reactions	BRD9 TR-FRET Assay Kit	-
	384 reactions	BRPF3 Inhibitor Screening Assay Kit	-
CECR2	384 reactions	CECR2 TR-FRET Assay Kit	Bromosporin
	384 reactions	CECR2 Inhibitor Screening Assay Kit	-
CREBBP	384 reactions	CREBBP TR-FRET Assay Kit	-
	384 reactions	CREBBP Inhibitor Screening Assay Kit	-
SMARCA2	384 reactions	SMARCA2 TR-FRET Assay Kit	PFI3
	384 reactions	SMARCA2 Inhibitor Screening Assay Kit	-

Bromodomains

靶点	板型	试剂盒名称	阳性化合物
SMARCA4	384 reactions	SMARCA4/BRG1 TR-FRET Assay Kit	PFI3
	384 reactions	SMARCA4/BRG1 Inhibitor Screening Assay Kit	-
TAF1(BD2)	384 reactions	TAF1 (BD2) TR-FRET Assay Kit	Bromosporine
	384 reactions	TAF1 (BD2) Inhibitor Screening Assay Kit	-
TAF1L(BD2)	384 reactions	TAF1L (BD2) Inhibitor Screening Assay Kit	-
TAF1L (BD1/BD2)	384 reactions	TAF1L (BD1/BD2) Inhibitor Screening	-
TRIM24	384 reactions	TRIM24 TR-FRET Assay Kit	-
	384 reactions	TRIM24 Inhibitor Screening Assay Kit	-
WDR9/BRWD1	384 reactions	WDR9/BRWD1 TR-FRET Assay Kit	-
BACE1	96-well plate	BACE1 FRET Assay Kit	Verubecestat
BRG1	384 reactions	SMARCA4/BRG1 TR-FRET Assay Kit	PFI3
	384 reactions	SMARCA4/BRG1 Inhibitor Screening Assay Kit	-
BRM	384 wells	BRM bromodomain TR-FRET Assay Kit	-
	1920 wells	BRM bromodomain TR-FRET Assay Kit	-
	9600 wells	BRM bromodomain TR-FRET Assay Kit	-
CBP	384 wells	CBP bromodomain TR-FRET Assay Ki	JQ1
	1920 wells	CBP bromodomain TR-FRET Assay Ki	JQ1
	9600 wells	CBP bromodomain TR-FRET Assay Ki	JQ1

Immnotherapy related

靶点	板型	试剂盒名称	阳性化合物
ARG1	384 reactions	ARG1 Inhibitor Screening Assay Kit	nor-NOHA
ARG2	384 reactions	ARG2 Inhibitor Screening Assay Kit	nor-NOHA
BTLA: HVEM	96-well plate	BTLA:HVEM[Biotinylated] Inhibitor Screening Assay Kit	HVEM-Fc
CD137	96-well plate	CD137[Biotinylated]:CD137L Inhibitor Screening Assay Kit	-

Immunotherapy related

靶点	板型	试剂盒名称	阳性化合物
CD226:CD112	384 reactions	CD226:CD112 Homogeneous Assay Kit	TIGIT-Fc
CD226:CD155	384 reactions	CD226:CD155 Homogeneous Assay Kit	CD155 mAb
CD28: B7-1	96-well plate	CD28:B7-1[Biotinylated] Inhibitor Screening Assay Kit	CTLA4-Fc
CD28: B7-2	96-well plate	CD28:B7-2[Biotinylated] Inhibitor Screening Assay Kit	CTLA4-Fc
	384 reactions	CD38 Inhibitor Screening Assay Kit (Hydrolase Activity)	-
CD38	96-well plate	CD38 Inhibitor Screening Assay Kit (Hydrolase Activity)	Apigenin
	96-well plate	CD38 Inhibitor Screening Assay Kit (Cyclase Activity)	Quercetin
CD47: SIRP- α	96-well plate	CD47:SIRP- α [Biotinylated] Inhibitor Screening Assay Kit	-
CD47: SIRP- γ	96-well plate	CD47:SIRP- γ [Biotinylated] Inhibitor Screening Assay Kit	SIRP
	384 reactions	CD73 Inhibitor Screening Assay Kit	AMPCP
CD73	96-well plate	CD73 Inhibitor Screening Assay Kit	AMPCP
	384 reactions	CTLA4:B7-1 TR-FRET Assay Kit	anti-CTLA4 mAb
CTLA4: B7-1	96-well plate	CTLA4:B7-1[Biotinylated] Inhibitor Screening Assay Kit	CTLA4 Ab
CTLA4: B7-2	96-well plate	CTLA4[Biotinylated]:B7-2 Inhibitor Screening Assay Kit	CTLA4 Ab
	384 reactions	GITR:GITRL TR-FRET Assay Kit	GITR Antibody
GITRL	96-well plate	GITRL:GITR[Biotinylated] Inhibitor Screening Assay Kit	GITR
	150 reactions	Universal IDO1/IDO2/TDO Inhibitor Screening Assay Kit	INCB024360
	50 reactions (96-well plate)	IDO1 Inhibitor Mechanism of Action Assay Kit	-
	384 wells	IDO1 Fluorogenic Inhibitor Screening Assay Kit -384	INCB024360
IDO1	96-well plate	Mouse IDO1 Inhibitor Screening Assay Kit	INCB024360
	384 reactions	IDO1 Inhibitor Screening Assay Kit -384	INCB024360
	96-well plate	IDO1 Fluorogenic Inhibitor Screening Assay Kit	INCB024360
	96-well plate	IDO1 Inhibitor Screening Assay Kit	INCB024360
	150 reactions	Universal IDO1/IDO2/TDO Inhibitor Screening Assay Kit	-
IDO2	96-well plate	Mouse IDO2 Inhibitor Screening Assay Kit	-
	96-well plate	IDO2 Inhibitor Screening Assay Kit	-

Immunotherapy related

靶点	板型	试剂盒名称	阳性化合物
IL17-RA	96-well plate	IL-17RA[Biotin]:IL-17A Inhibitor Screening Assay Kit	Anti-IL-17A Antibody
KEAP1-Nrf2	96-well plate	KEAP1-Nrf2 Inhibitor Screening Assay Kit	Nrf2 peptide
MAT2A	384 reactions	MAT2A Inhibitor Screening Assay Kit	FIDAS-5
	384-well format	NAMPT Inhibitor Screening Assay Kit	FK866
NAMPT	96-well plate	NAMPT Inhibitor Screening Assay Kit	FK866
OX40: OX40L	96-well plate	OX40[Biotinylated]:OX40L Inhibitor Screening Assay Kit	OX40[Biotinylated]: OX40L
	384 reaction format	PD-1:PD-L1 TR-FRET Assay	BMS-202
PD-1: PD-L1	96-well plate	PD-1:PD-L1 TR-FRET Assay	-
	384 reactions	PD-1[Biotinylated]:PD-L1 Homogeneous Assay Kit	PD-L1 antibody
	384 reactions	PD-1:PD-L2 Homogeneous Assay Kit	PD-1 antibody
	96-well plate	PD-1[Biotinylated]:PD-L2 Inhibitor Screening Colorimetric Assay Kit	PD-1 Neutralizing Antibody
PD-1:	96-well plate	PD-1:PD-L2[Biotinylated] Inhibitor Screening Colorimetric Assay Kit	PD-1 Neutralizing Antibody
PD-L1	384-well format	PD-1:PD-L2 TR-FRET Assay Kit	PD-1 Neutralizing Antibody
	96-well plate	PD-1[Biotinylated]:PD-L2 Inhibitor Screening Assay Kit	PD-1 Neutralizing Antibody
	96-well plate	PD-1:PD-L2[Biotinylated] Inhibitor Screening Assay Kit	PD-1 Neutralizing Antibody
KEAP1-Nrf2	96-well plate	KEAP1-Nrf2 Inhibitor Screening Assay Kit	Nrf2 peptide
	384-well format	TDO Fluorogenic Inhibitor Screening Assay Kit -384 (Human)	680C91
	384-well format	TDO Inhibitor Screening Assay Kit -384	680C91
TDO	96-well plate	TDO Fluorogenic Inhibitor Screening Assay Kit (Human)	680C91
	96-well plate	TDO Inhibitor Screening Assay Kit	680C91
TIGIT: CD112	384 reactions	TIGIT:CD112 Homogeneous Assay Kit	anti-TIGIT antibody
TIGIT: CD155	384 reactions	TIGIT:CD155 Homogeneous Assay Kit	anti-TIGIT antibody
	384 reactions	TPH1 Inhibitor Screening Assay Kit	Telotristat
TPH1	96-well plate	TPH1 Inhibitor Screening Assay Kit	Telotristat
	384 reaction format	TPH2 Inhibitor Screening Assay Kit	Telotristat
TPH2	96-well plate	TPH2 Inhibitor Screening Assay Kit	Telotristat

Methyl-lysine

靶点	板型	试剂盒名称	阳性化合物
CBX1	384 reactions	CBX1 Inhibitor Screening Assay Kit	3MeK9 H3 1_21
L3MBTL1	384 reaction format	L3MBTL1 TR-FRET Assay Kit	UNC1215
	384 reactions	L3MBTL1 Inhibitor Screening Assay Kit	UNC1215

Heat shock protein

靶点	板型	试剂盒名称	阳性化合物
HSP90α	96 reaction format	HSP90α C-Terminal Domain TR-FRET Assay Kit	Novobiocin
	384 reaction format	HSP90α (C-Terminal Domain) TR-FRET Kit	Novobiocin
	384 reaction format	HSP90α (C-Terminal) Inhibitor Screening Assay Kit	Novobiocin
	96-well plate	HSP90α N-Terminal Domain Assay Kit	Geldanamycin
	384-well format	HSP90α (N-terminal) Assay Kit	-
HSP90β	384-well format	HSP90β (N-terminal) Assay Kit	MS-275
	96-well plate	HSP90β N-Terminal Domain Assay Kit	MS-275
	384 reaction format	HSP90β (C-Terminal Domain) TR-FRET Kit	Novobiocin
	384 reactions	HSP90β (C-terminal) Inhibitor Screening Kit	Novobiocin

Others

靶点	板型	试剂盒名称	阳性化合物
COX1	96 wells	COX-1 (human) Inhibitor Screening Assay Kit	-
COX2	96 wells	COX-2 (human) Inhibitor Screening Assay Kit	-
FAAH	96 wells	Fatty Acid Amide Hydrolase Inhibitor Screening Assay Kit	-
FABP4	96 wells	FABP4 Inhibitor/Ligand Screening Assay Kit	-
HAT	96 wells	HAT Inhibitor Screening Assay Kit	-
Lipoxygenase	96 wells	Lipoxygenase Inhibitor Screening Assay Kit	-
Monoacylglycerol Lipase	96 wells	Monoacylglycerol Lipase Inhibitor Screening Assay Kit	-

Others

靶点	板型	试剂盒名称	阳性化合物
Myeloperoxidase	2 x 96 wells	Myeloperoxidase Inhibitor Screening Assay Kit	-
PAD2	96 wells	PAD2 Inhibitor Screening Assay Kit (AMC)	-
	96 wells	PAD2 Inhibitor Screening Assay Kit (Ammonia)	-
	96 wells	PAD4 Inhibitor Screening Assay Kit (Ammonia)	-
PAD4	96 wells	PAD4 Inhibitor Screening Assay Kit (AMC)	-
	96 wells	PAD1 Inhibitor Screening Assay Kit (AMC)	-
PAF Acetylhydrolase	96 wells	PAF Acetylhydrolase Inhibitor Screening Assay Kit	-
PPARγ	96 wells	PPARγ Ligand Screening Assay Kit	-
Soluble Epoxide Hydrolase	96 wells	Soluble Epoxide Hydrolase Inhibitor Screening Assay Kit	-
	480 wells	Soluble Epoxide Hydrolase Cell-Based Assay Kit	-
	96 wells	sPLA2 (Type V) Inhibitor Screening Assay Kit	-
PCSK9	384 wells	PCSK9-LDLR TR-FRET Assay Kit	PCSK9 Neutralizing Antibody
	384 wells	PCSK9(D374T)-LDLR TR-FRET Assay Kit	PCSK9 Ab
	96 wells	PCSK9[Biotinylated]-LDLR Binding Assay Kit	PCSK9 Ab
PTP1b	96 wells	PTP1B Colorimetric Assay Kit	-
EGFR 突变体 EGFR (T790M/C797S/ L858R)	96 wells	EGFR (T790M/C797S/ L858R) Kinase Assay Kit	-
USP7	96 wells	USP7 Inhibitor Screening Assay Kit	-
AGE-AGER	96 wells	AGE-AGER in vitro Binding Assay Kit	-
COX	2 X 96 wells	COX Fluorescent Inhibitor Screening Assay Kit	-
HDAC8	96 wells	HDAC8 Inhibitor Screening Assay Kit	-
COX	96 wells	COX (human) Inhibitor Screening Assay Kit	-
H-PGDS	384 wells	Prostaglandin D Synthase (hematopoietic-type) FP-Based Inhibitor Screening Assay Kit - Green	-
PAF	96 wells	PAF Acetylhydrolase Inhibitor Screening Assay Kit	-
Renin	96 wells	Renin Inhibitor Screening Assay Kit	-
HDAC1	96 wells	HDAC1 Inhibitor Screening Assay Kit	-
LSD1	96 wells	LSD1 Inhibitor Screening Assay Kit	-
DPP4	96 wells	DPP (IV) Inhibitor Screening Assay Kit	-

Others

靶点	板型	试剂盒名称	阳性化合物
COX Colorimetric	2 X 96 wells	COX Colorimetric Inhibitor Screening Assay Kit	-
PAD1	96 wells	PAD1 Inhibitor Screening Assay Kit (AMC)	-
Fatty Acid Amide Hydrolase	96 wells	Fatty Acid Amide Hydrolase Inhibitor Screening Assay Kit	-
ACC1	96 reactions	Acetyl-Coenzyme A Carboxylase 1 (ACC1) Assay Kit	-
ACC2	96 reactions	Acetyl-Coenzyme A Carboxylase 2 (ACC2) Assay Kit	-
SHP-2 (Full-Length)	96 reactions	SHP-2 (Full-Length) Homogeneous Assay Kit	-
	348 reactions	SHP-2 (Full-Length) Homogeneous Assay Kit	-
ALK1	96 wells	ALK1 Kinase Assay Kit	-
BRAF(V600E)	96 wells	BRAF (V600E) Kinase Assay Kit	-
EGFR 突变体 EGFR (T790M/C797S/ L858R)	96 wells	EGFR (T790M/C797S/ L858R) Kinase Assay Kit	-
USP7	96 wells	USP7 Inhibitor Screening Assay Kit	-

我们的优势

- 广泛的酶学靶点类型，陶术生物能够为客户提供超过 600 种（含 200 多种激酶）不同酶学靶点模型的筛选和分析；
- 收到客户化合物后快速完成检测；
- 试验灵活，既可以提供单点结合检测分析，也可以提供 IC50 检测分析；
- 能够提供多种检测方法，满足客户在药物筛选方面的需求；
- 严格保证客户信息安全，陶术生化将严格按照与客户签订的保密合同执行服务。

酶类靶点筛选的主要检测方法

客户只需要提供待测靶点的化合物，每个 2-3mg，我们会安排相应的筛选和检测服务，最终提供专业的检测分析报告。

询价及订购

感谢您选择我公司的酶学靶点药物筛选与分析服务。如有任何相关的问题，请您联系我们的工作人员，我们即刻为您解答和服务。

抗肿瘤药物体外筛选

抗肿瘤药物的体外检测，是目前体外筛选技术比较常见的应用，我们拥有超过 140 多种经过 STR 鉴定的人源肿瘤细胞库，为广大客户提供各种化合物的初步筛选。除了针对酶学靶点直接进行筛选外，还可以在药物具体作用靶点未知的情况下，以细胞整体为研究对象，对化合物的作用进行检测和评估，进而筛选出更为有效和安全的药物。陶术生物具有多年药物筛选经验，可以为客户提供多种优质服务，并能根据客户的具体需求进行实验方案的设计与规划，为客户提供合适的解决方案，助您在药物研发早期快速找到具有开发潜力的化合物结构。



人源肿瘤细胞模型

种类	人源肿瘤细胞
胶质瘤	A172、U-118 MG、U-87 MG、U251
口舌鼻咽喉癌	KB、Tca-8113、CAL 27、CNE、FaDu、HEp-2
甲状腺	SW579、TT
食道癌	Eca-109、TE-1
乳腺癌	ZR-75-1、SK-BR-3、MDA-MB-468、MDA-MB-453、MDA-MB-231、MCF-7、BT-474、T-47D、BT-549、MDA-MB-435、Hs 578T
胃癌	SNU-1、NCI-N87、KATO III、BGC-823、HGC-27、AGS
肝癌	Hep G2、Hep 3B2.1-7、HCCC-9810、HuH-7、QGY-7701、RBE、HuH-6
肺癌	NCI-H460、NCI-H358、NCI-H1650、NCI-H1299、NCI-H292、HCC827、A549、SK-MES-1、Calu-6、NCI-H1975、95-D、NCI-H226、SPC-A-1、Calu-3
胆囊癌	GBC-SD
胰腺癌	SW 1990、PANC-1、CFPAC-1、BxPC-3、AsPC-1
前列腺癌	PC-3、PC-3M、DU 145、22RV1
肾癌	SK-NEP-1、Caki-1、786-O(786-0)、OS-RC-2、769-P
卵巢癌	SK-OV-3、OVCAR-3、HO-8910
子宫颈癌	C-33 A、MS751、SiHa、Ca Ski、HeLa、HCC 94、Ishikawa、ME-180
子宫内膜腺癌	RL95-2、HEC-1-A、HEC-1-B、C-33 A、MS751、SiHa、Ca Ski、HeLa、HCC 94、Ishikawa、ME-180
膀胱癌	5637、UM-UC-3、SW 780、J82、T24、EJ-1、RT4
结肠癌	SW620、LoVo、HT-29、HCT 116、COLO 205、RKO-E6、SW1116、RKO、LS 174T、Caco-2、SW480 [SW-480]、DLD-1、HCT-15

人源肿瘤细胞模型

种类	人源肿瘤细胞
骨肉瘤	Saos-2、U-2 OS、MG-63、SW 1353
神经母细胞瘤	SK-N-SH、SK-N-BE(2)、SH-SY5Y[SHSY-5Y]
淋巴瘤	CA46、Raji、NAMALWA、RAMOS、U-937、Daudi
皮肤癌，黑色素瘤	A-431、A-375、C918
白血病	HuT 78、6T-CEM、Jurkat, Clone E6-1、KG-1、CCRF-CEM、CEM/C1、HL-60、K-562、THP-1、A3、HEL
其他	RD、JAR、JEG-3、HT-1080、Acc-2、etc.

样品提供

客户只需要提供待测靶点的化合物，每个 2-3mg，我们会安排相应的筛选和检测服务，最终提供专业的检测分析报告。

询价及订购

感谢您选择我公司的酶学靶点药物筛选与分析服务。如有任何相关的问题，请您联系我们的工作人员，我们即刻为您解答和服务。

体外模型开发与验证

在药物研发早期，建立离体的筛选模型无疑是一种经济而高效的策略。陶术生物在药物筛选模型建立方面有着丰富的经验，平台主要成员均拥有多年为国内外知名药企建立模型的经验，我们精通 G 蛋白偶联受体、离子通道和报告基因等细胞水平和非细胞水平的各种模型构建，为药物早期研发的高通量筛选和结构及效果研究（SAR）提供了模型基础，药物筛选平台自主开发新的药物筛选靶点细胞株、各种诱导药物筛选模型以及药物通透性与转运体研究模型等，正在逐渐丰富细胞水平的药物靶标或非靶标筛选模型，也可根据客户要求

进行定制模型的开发与验证。

体外模型开发与验证

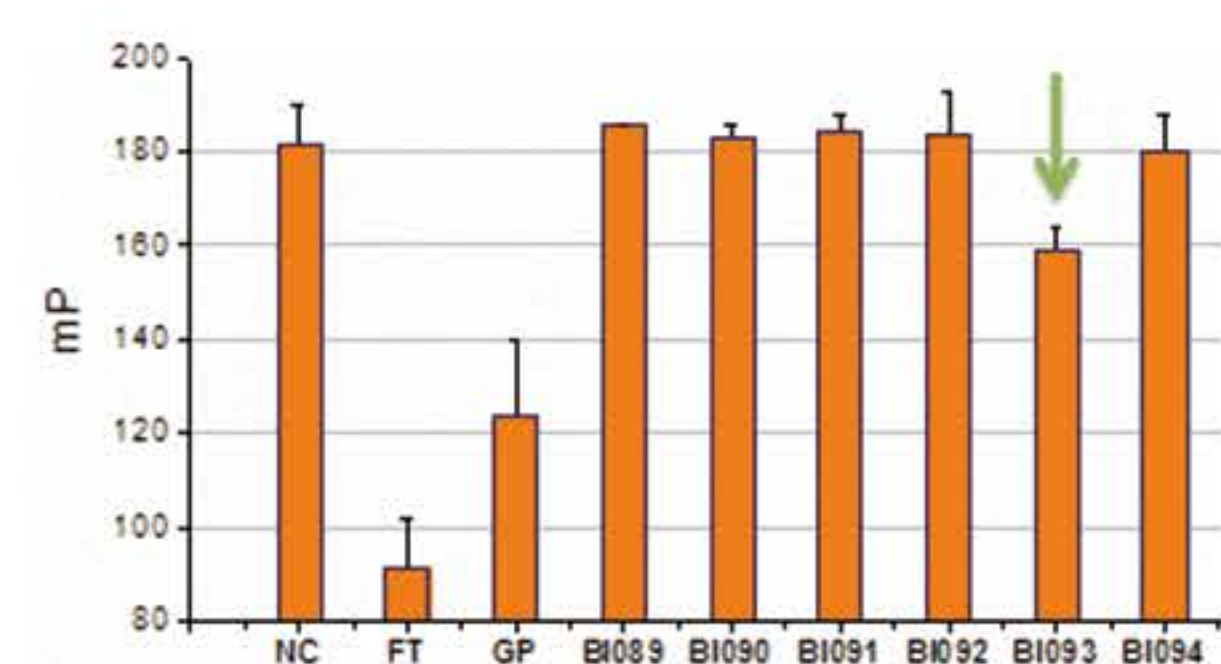
Cat.No.	Cell Model	Comment	Application
IV001	GLP1R 胰高血糖素样肽 1 受体钙流筛选模型	EC50/IC503 个起测：单一浓度筛选 10 个起测，每个化合物测 8 个或 11 个	糖尿病
IV002	5-HT2A 五羟色胺 2A 受体钙流筛选模型	EC50/IC503 个起测：单一浓度筛选 10 个起测，每个化合物测 8 个或 11 个	精神分裂症，癫痫
IV003	a2A 肾上腺素受体钙流筛选模型	EC50/IC503 个起测：单一浓度筛选 10 个起测，每个化合物测 8 个或 11 个	高血压
IV004	D2R 受体钙流筛选模型	EC50/IC503 个起测：单一浓度筛选 10 个起测，每个化合物测 8 个或 11 个	神经系统相关
IV004	神经损伤保护模型	缺糖、缺氧、自由基、咖啡因、NO、谷氨酸等	神经系统相关

体外模型开发与验证

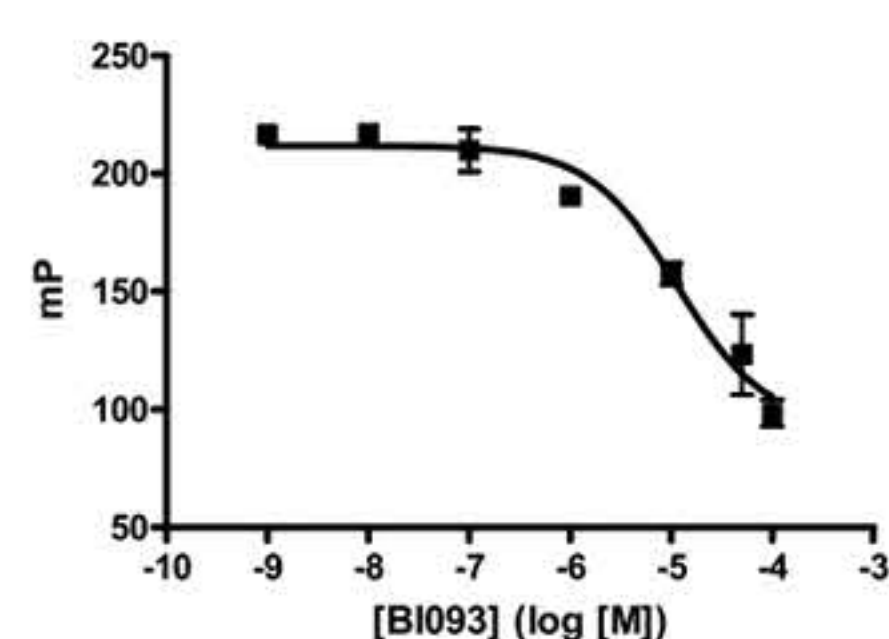
Cat.No.	Cell Model	Comment	Application
MS001	G 蛋白偶联受体重组细胞系构建	基于钙离子或 cAMP 浓度检测的单克隆细胞模型，可稳定测试 20 代	药物筛选模型构建
MS002	离子通道重组细胞系构建	基于膜电位的单克隆细胞模型，可稳定测试 20 代	精神分裂症，癫痫
MS003	报告基因重组细胞系构建	基于报告基因的单克隆细胞模型，可稳定测试 20 代	药物筛选模型构建
MS004	基于 CRISPR 技术 DNA 水平修饰细胞系构建	客户须告知敲除或突变基因信息和细胞系	靶点验证
MS005	shRNA 稳转细胞系构建	客户须告知干扰的基因	靶点验证
MS006	G 蛋白偶联受体对钙流检测	客户提供细胞系，构建筛选模型	筛选模型验证
MS007	G 蛋白偶联受体的 cAMP 检测	客户提供细胞系，构建筛选模型	筛选模型验证
MS008	离子通道的检测	客户提供细胞系，构建筛选模型	筛选模型验证
MS009	报告基因检测	客户提供细胞系，构建筛选模型	筛选模型验证
MS010	激酶和其他酶的生化分析	客户提供酶，构建筛选模型	药物筛选模型构建
MS011	细胞水平的激酶检测	细胞原位的酶学研究模型	药物筛选模型构建
MS012	通透性与转运体实验	PAMA 模型，MDCK 模型，Caco-2 模型	药物筛选

优势项目举例

Bcl-2 基因 (即 B 细胞淋巴瘤 / 白血病 -2 基因) 是一种原癌基因,它具有抑制凋亡的作用,近年来的一些研究已开始揭示这一作用的机制。目前已经发现的 Bcl-2 蛋白家族按功能可分为两类,一类是像 Bcl-2 一样具有抑制凋亡作用,如哺乳动物的 Bcl-xL、Bcl-W、Mcl-1、线虫 Ced-9 等,而另一类具有促进凋亡作用,如 Bax、Bak。陶素生化自主开发体系检测 Bcl-2 家族的抑制凋亡基因 Bcl-2, Mcl-1 和 Bcl-xL。使用的荧光多肽可与 3 种蛋白特异性结合,可通过荧光极化检测精准检测蛋白与待测化合物的结合。准确测定其 IC₅₀ 值,进而导出其竞争性抑制常数 K_i。



【1】单浓度初筛结果示意



【2】FP 实验测量得到的某化合物在不同浓度下的竞争性抑制曲线

服务目录	参考周期
Bcl-2	2 周
Mcl-1	2 周
Bcl-xL	2 周

药物作用机理实验

在药物研发过程中,对于有生物学功能而没有具体药物靶标的化合物来说,靶标的寻找和发现显得尤为重要,我们通过分子生物和细胞生物的相关实验帮助揭示药物作用过程中基因和蛋白水平的变化,帮助寻找药物作用靶标或进行药靶验证。对于已知药靶的化合物也可通过分子和细胞生物手段进行更深入的信号通路研究。

细胞与蛋白基因检测

服务目录	参考周期
流式细胞凋亡检测	1-2 周
流式细胞周期检测	1-2 周
Western Blot 检测	1-2 周
mRNA- 实时荧光定量 PCR	1-2 周
microRNA- 实时荧光定量 PCR	1-2 周

计算机辅助药物设计

随着科技的发展,计算机辅助药物设计 (computer aided drug design, CADD) 得到了越来越多科学家的认可。CADD 以计算机化学为基础,通过计算机的模拟、计算和预算药物与受体生物大分子之间的关系,设计和优化先导化合物。与直接进行高通量筛选不同, CADD 能够更加合理地分析受体与药物之间作用的可能性,为药物研发提供一定的方向。

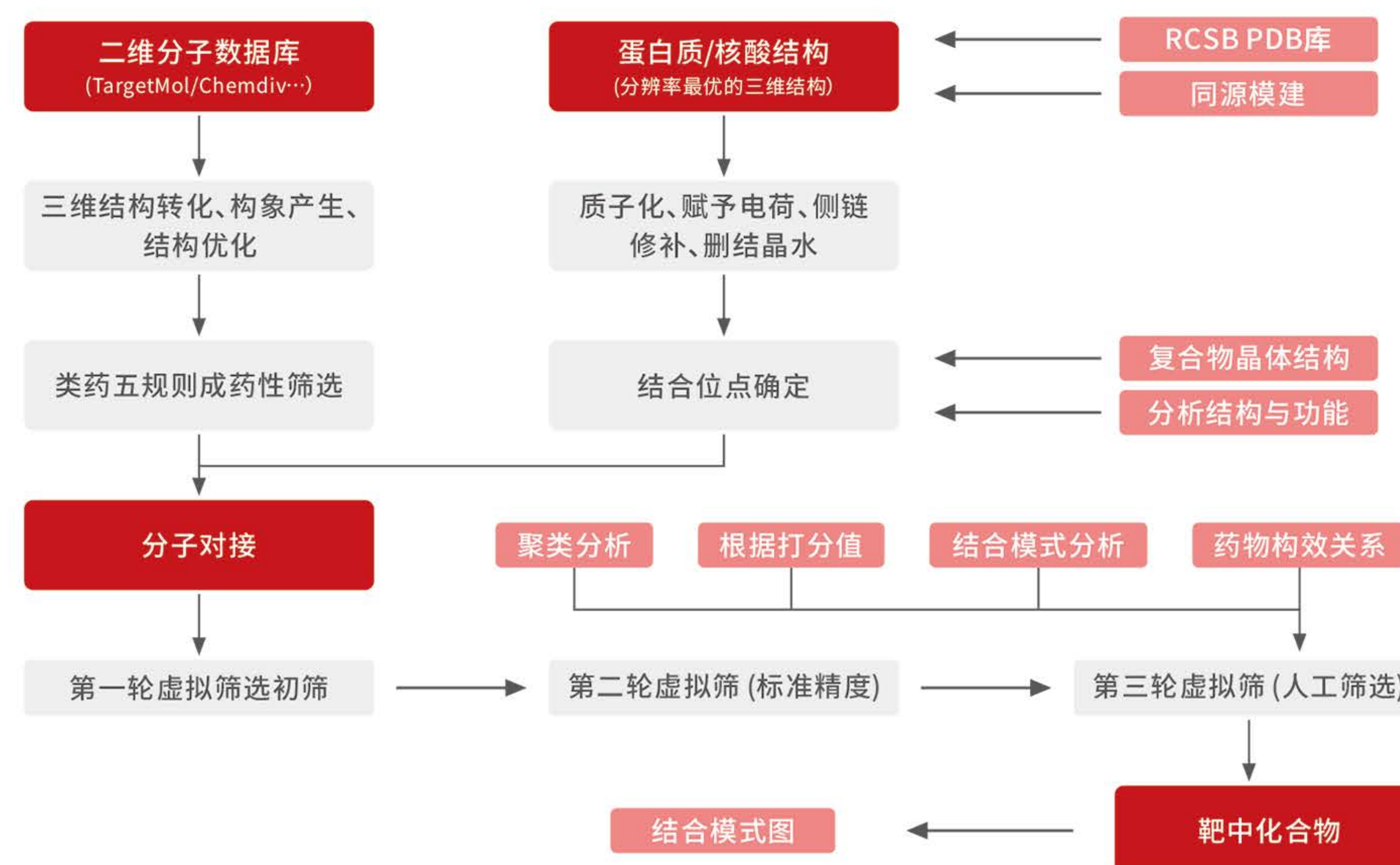
计算机虚拟筛选

虚拟筛选是一种用于药物发现的计算技术,用于搜索小分子文库,以鉴定最可能结合药物靶标 (通常是蛋白质受体或酶) 的那些结构。与传统的实验高通量筛选相比,虚拟筛选是一种更直接,更合理的药物发现方法,并且具有低成本和有效筛选的优势。虚拟筛选可用于先导化合物的研究。

在先导化合物的研究中,虚拟筛选技术通过选择大型数据库化合物进行筛选,为发现新型活性物质提供了一种快速而经济的方法。此外,对于无法获得常规高通量筛选资源的较小公司或者科研单位,此类方法对于选择用于筛选的分子至关重要。高通量对接方法的改进和优化,提高了实验数据的可靠性,筛选结果的命中率也得到了改善。实验性 HTS 的典型命中率范围为 0.01%至 0.14%,而预期虚拟筛选的命中率通常范围为 2%至 40%。

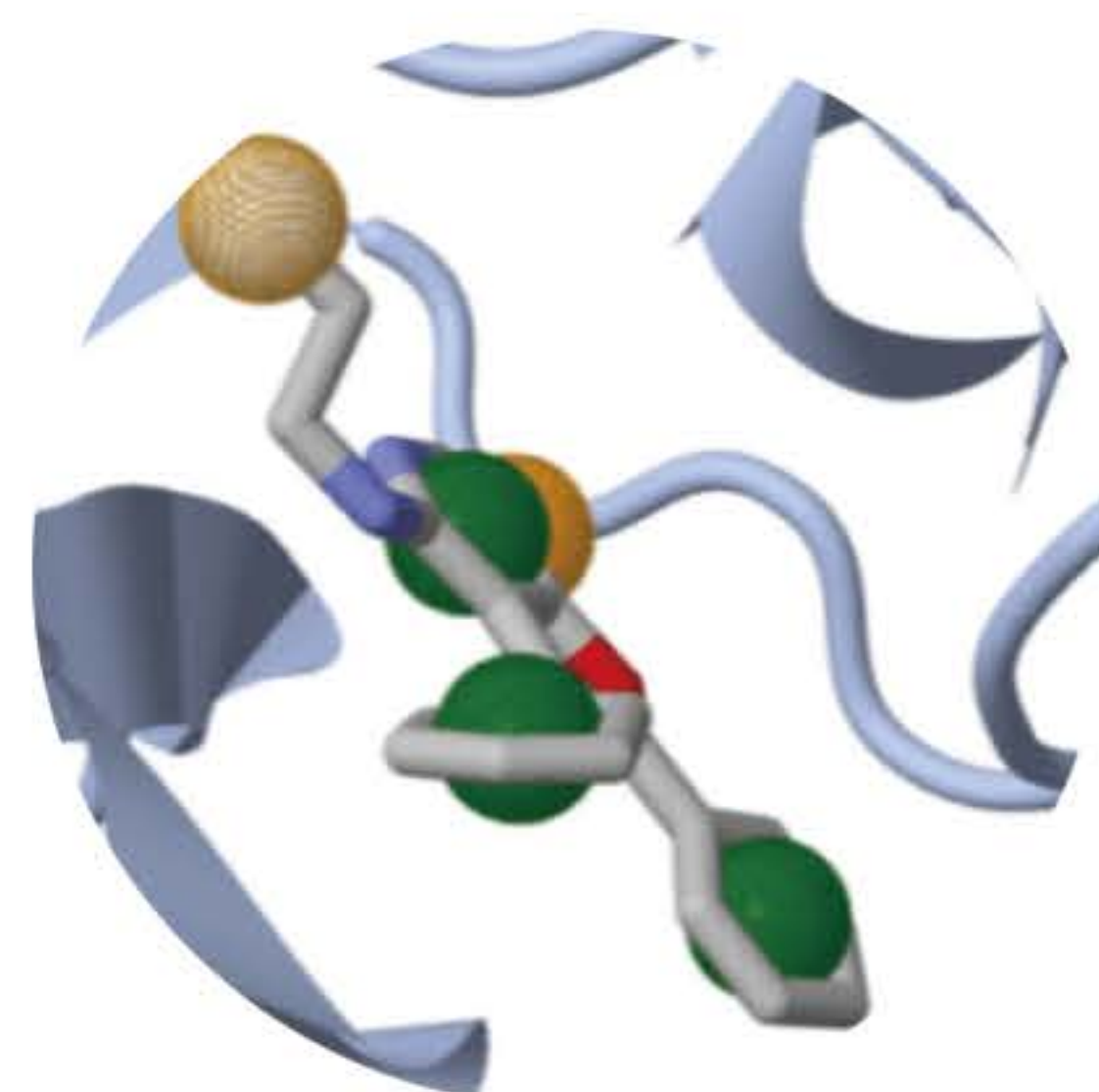
基于分子对接的虚拟筛选

分子对接是一种基于靶标蛋白三维结构的药物筛选方式。通过小分子化合物与靶标进行分子对接,综合分析得分及空间构象情况,包括静电作用、氢键作用、疏水作用、范德华作用等性质,可以探索配体小分子与受体生物大分子具体作用方式和结合构型,解释化合物产生活性的原因,为合理地优化化合物结构提供指导;通过结合亲和力打分函数,小分子化合物与靶蛋白的结合能力可以定量地得到评价,为候选化合物的挑选提供依据,筛选潜在活性化合物,为实验提供参考。基于分子对接的小分子化合物的虚拟筛选是目前较有潜力的药物开发工具,由于分子对接过程对化合物结构并没有限制,基于分子对接的虚拟筛选完全有可能获得结构新颖的先导化合物。可以有效的节约时间和费用,这对于发展创新药物无疑起到积极的推动作用。



基于药效团的虚拟筛选

药效团是一种基于小分子化合物的高效药物筛选手段。通过分析一个或多个活性小分子的药效特征，推纳概括出使得分子具有活性的重要药效基团特征。药效团筛选的计算量较小，可以在分子对接前进行，对几百万或几千万的小分子数据库进行药效团筛选只需要很短时间。客户只需要提供 1 个或多个活性分子，就可以构建公共药效团进行筛选，搜索含相同特征的小分子，并指导新活性分子的合成。一些分子模拟软件还提供方法来预测匹配分子的生物活性，如基于药效团的 QSAR 模型等。但是，基于药效团模型的虚拟筛选通常获得与构建模型所用的化合物结构性质类似的分子结构，在发展新颖骨架的先导化合物方面具有一定的局限性。



定量构效关系

定量构效关系 (QSAR) 是一种借助分子的理化性质参数或结构参数，以数学和统计学手段定量研究有机小分子与生物大分子相互作用以及其在生物体内的 ADME 性质的方法。这种方法广泛应用于药物、农药、化学毒剂等生物活性分子的合理设计中。

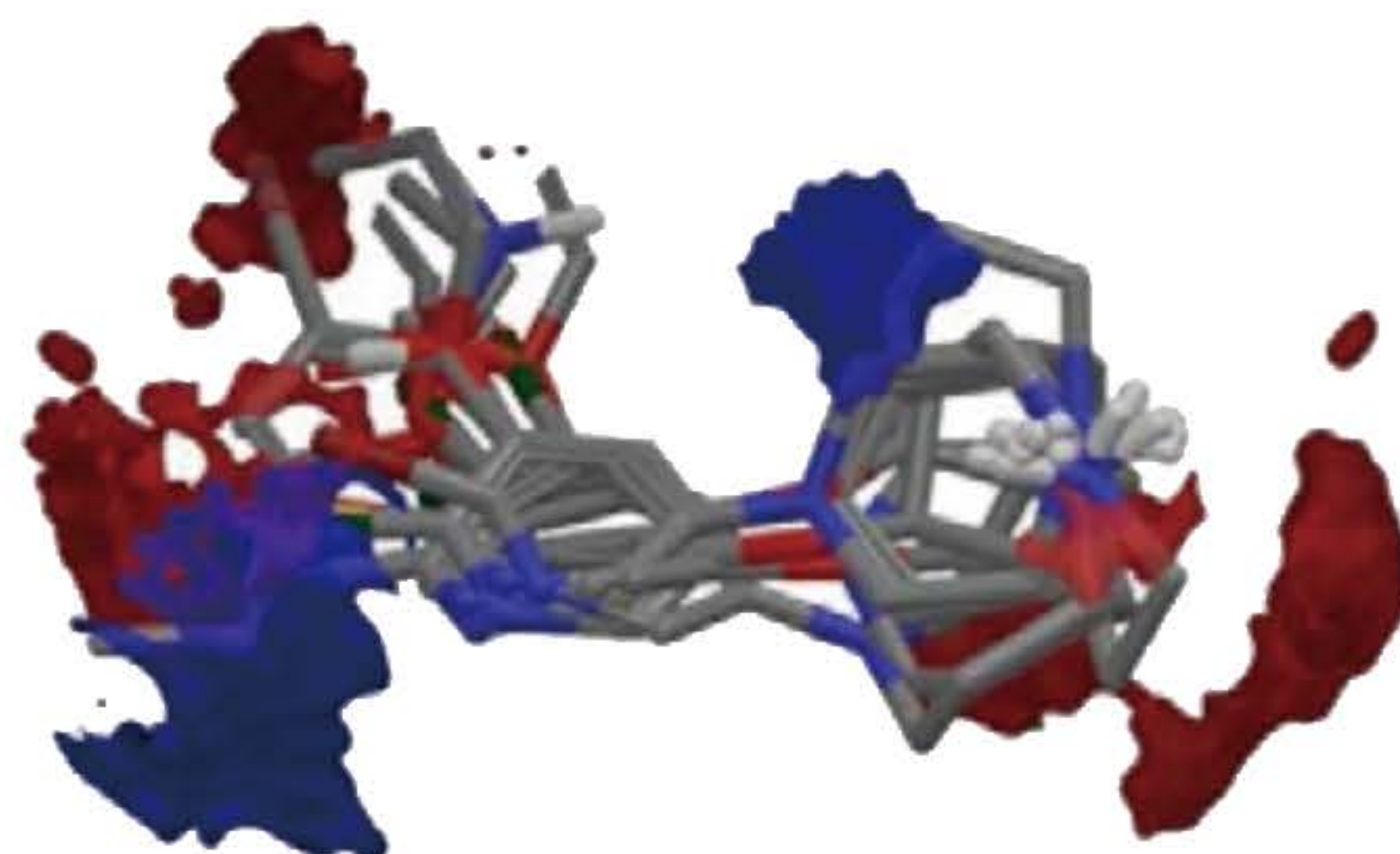
我们采用定量构效关系，主要进行以下两方面的研究：

2D-QSAR

- 指导化合物结构改造；
- 虚拟筛选，发现新型活性化合物。

3D-QSAR

- 预测化合物与生物大分子的结合模式；
- 指导先导化合物结构优化。

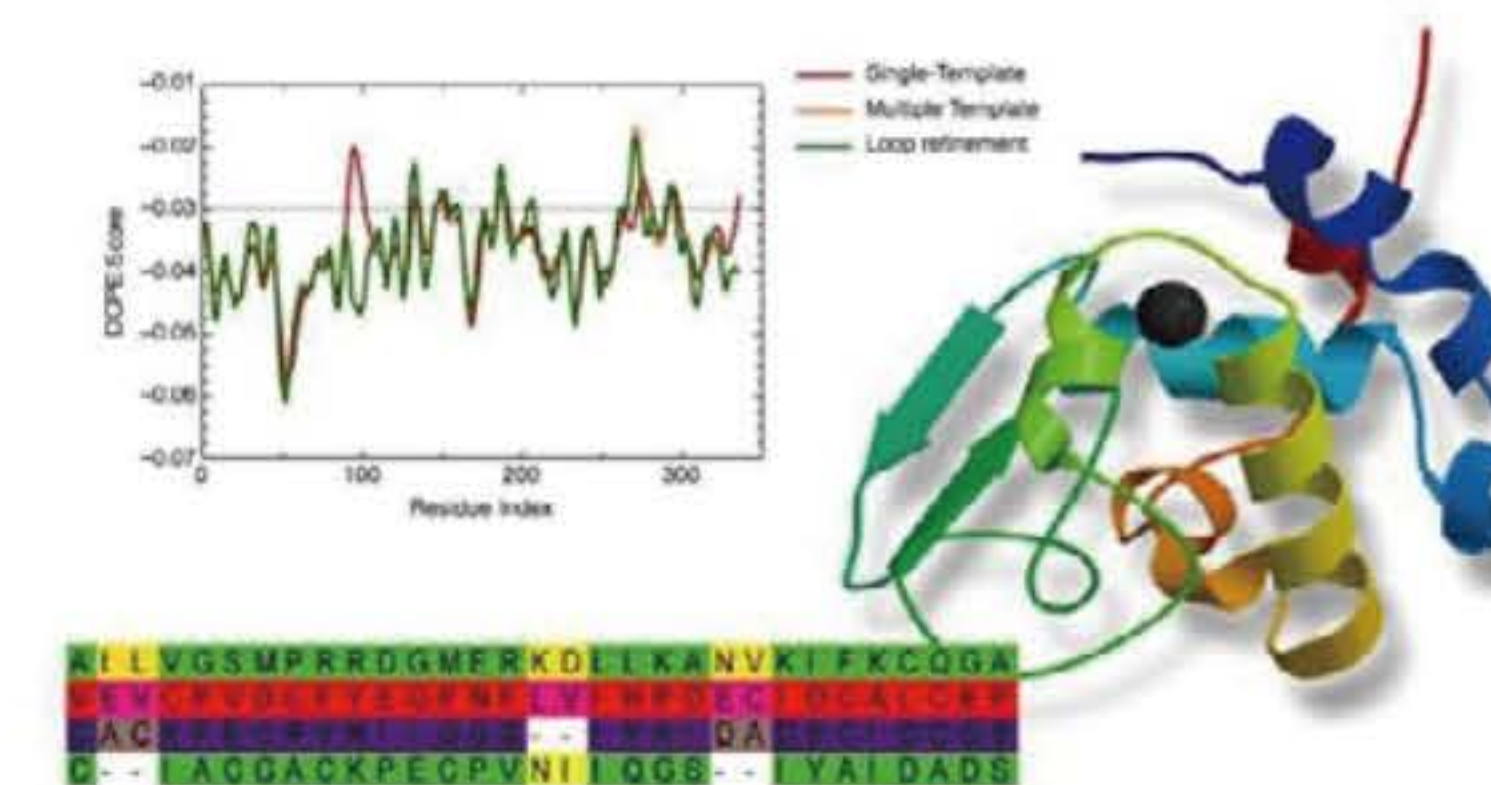


同源建模

同源建模 (Homology Modeling) 是指根据模板蛋白将一级序列转成 3D 结构。我们在获得蛋白质的序列后，可通过与同源蛋白的结构比对预测目标蛋白的三级结构。对于尚未或者无法获得实验晶体结构的蛋白质，同源建模无疑是一种重要而有效的辅助手段。

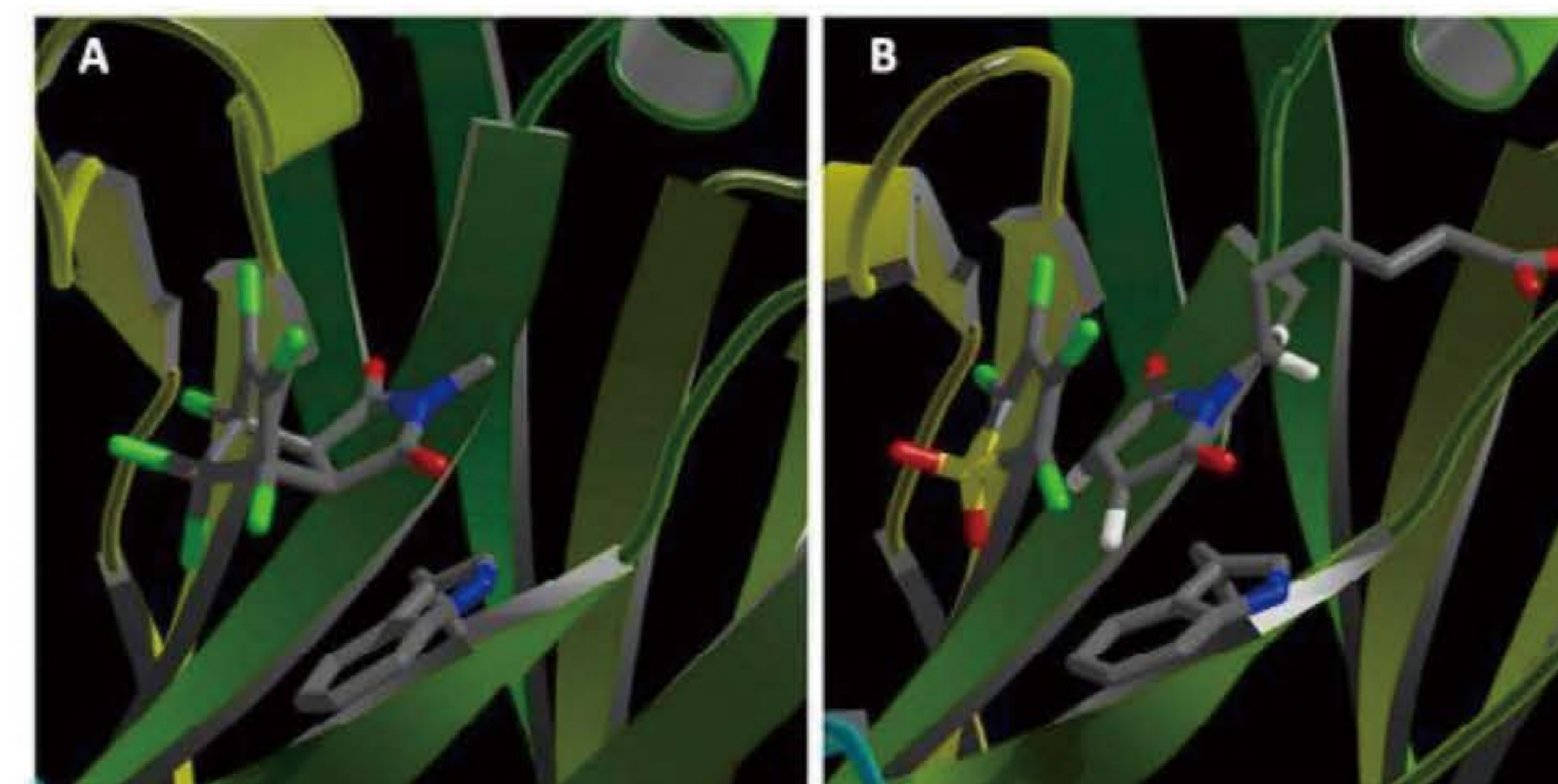
步骤流程

- 序列搜索和比对，获得同源蛋白质序列和结构；
- 结构比对，构建目标蛋白三维结构；
- 利用分子动力学模拟等方法进行结构优化。



分子动力学模拟

分子动力学 (Molecular Dynamics, MD) 模拟是一套分子模拟方法，该方法主要是依靠牛顿力学来模拟分子体系的运动，在由分子体系的不同状态构成的系统中抽取样本，计算体系的热力学量和其他宏观性质。引入量子力学方法后，可将研究领域进一步扩展到反应机理的研究。



我们采用分子动力学模拟方法进行以下多方面的研究：

常规分子动力学模拟

- 研究配体 - 受体复合物体系的相互作用机制：相互作用模式、诱导契合效应、蛋白骨架运动；
- 预测活性小分子的结合自由能（从而预测 K_i 、 IC_{50} ），阐明机理或指导结构改造；
- 优化蛋白结构，如对同源建模得到的结构进行结构优化。

常见分析内容

- 骨架波动：RMSD、RMSF；
- 相互作用：氢键、盐桥、角度、二面角、水合作用、相互作用谱；
- 结合自由能：MM/PB (GB) SA；
- 构象采样：聚类、PCA、简正模分析、二级结构分析、势能面分析、优势构象识别；
- 热点残基：丙氨酸扫描、能量分解。

其他高级方法

- 膜蛋白分子动力学；
- 拉伸分子动力学 (SMD)；
- 副本交换分子动力学 (REMD)；
- 靶向分子动力学 (TMD)；
- 微动弹性带 (NEB) 计算。

QM/MM

- 研究酶催化机理，常常包含过度态历程；
- 质子转移、电荷迁移反应过程；
- 诱导发光机理。

量化计算

量子化学 (Quantum Chemistry) 计算，应用了量子力学的规律和方法来研究化学问题。通过引入量子化学计算，我们得以使用电子结构模型来研究一系列的化学现象，探究其化学本质，如化学性质检测、化学反应机理研究、波普预测 (IR、UV-Vis、NMR、荧光光谱、ECD、VCD、ROA、ORD、EPR/ESR)；等等。我们采用量化计算技术，主要进行以下五方面的研究：

激发态反应

- 激发态结构确定
- 激发能、跃迁偶极矩
- 荧光、磷光光谱

波普预测

- IR、UV-Vis
- NMR、EPR/ESR
- ECD、VCD、ROA、ORD

化学反应机理

- 稳态及过渡态结构优化 / 确定
- 反应热、反应能垒及反应动力学

弱相互作用

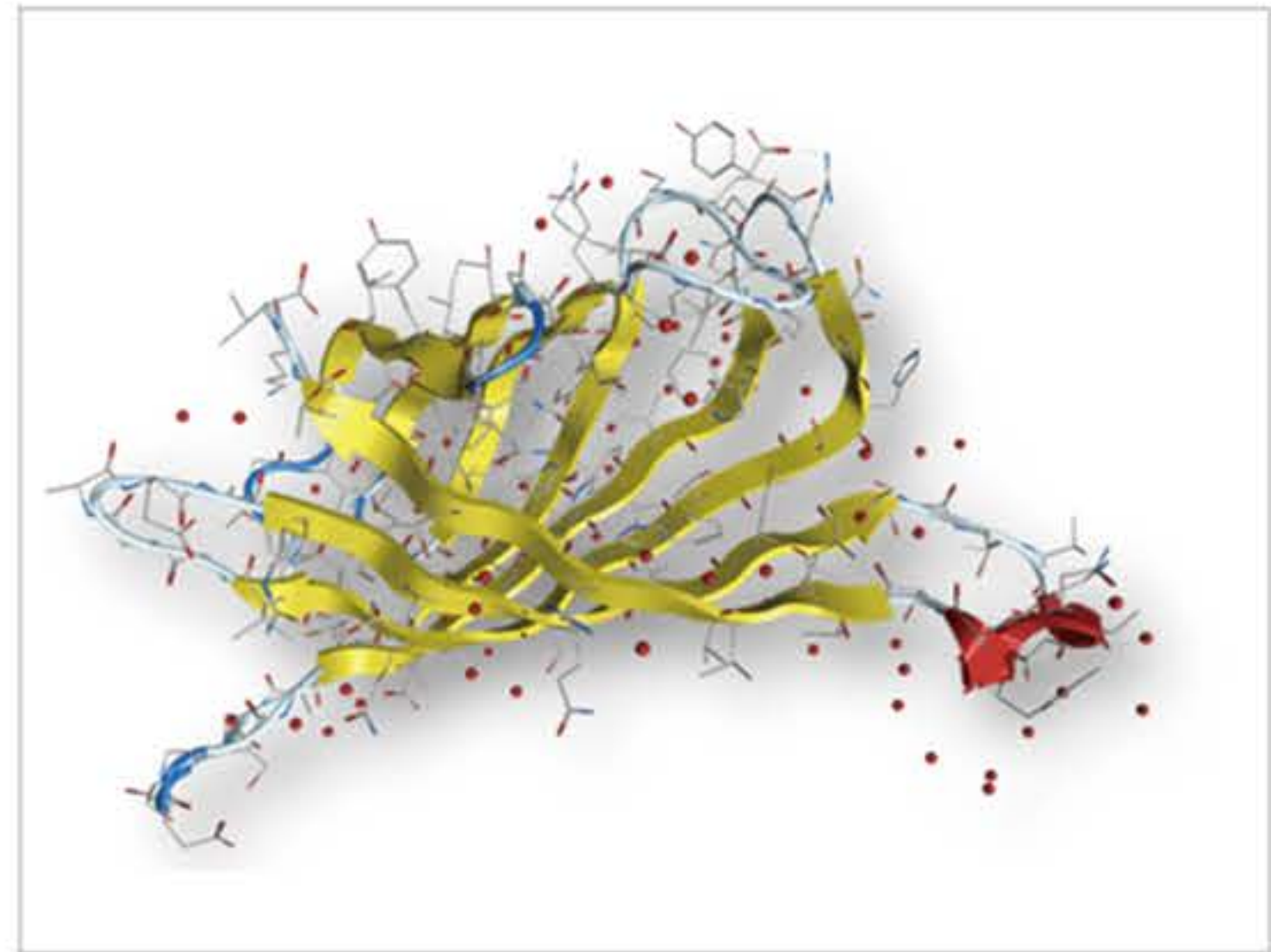
- 氢键、 π 键
- 范德华作用

分子性质预测

- 静电势、电荷分布
- 偶极矩与可极化率
- 分子轨道分析
- 频率分析
- 热化学性质
- 电子亲和能、电离势

虚拟筛选化合物库

计算机辅助药物设计 (CADD) 能够快速分析大量化合物结构与靶点结合的可能性，在研究前期通过 CADD 分析可以大大地缩小筛选范围，增加后期实验的成功率。不过 CADD 预测和实际的实验结果之间往往存在一定差异，需要活性实验来验证，因此能够购买到实体化合物是非常重要的。理论上可排列出的类药分子数量达到 1063 个，但只有一两千万的化合物能够商业化购买。陶术生物已与数十家全球大型化合物供应商建立了紧密合作关系，收录超过 780 万种现货筛选化合物（见下表）以及 12 亿可快速定制合成化合物，为 CADD 研究提供大量筛选结构样本，并为后续供应提供了有力保障。这些数据均可免费为客户提供，如果您有 CADD 筛选的需求，欢迎随时和我们的技术支持联系。陶术生物还提供虚拟筛选服务和活性验证服务，为没有实验条件的客户提供高性价比的技术服务。



品牌名称	数量	特征
Targetmol	8,000	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	1,601,806	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	2,603,564	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	1,519,712	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 Chemicals	525,608	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	210,331	源自荷兰的化合物品牌，价格优势明显。
Vitas-M	776,589	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	486,376	源自俄罗斯的化合物品牌，拥有多种天然产物及衍生物。
Maybridge	53,358	源自英国的化合物品牌，Thermofisher 旗下，产品数量少而专，每种产品均有较大库存。
Bionet-Key Organics	55,270	源自英国的品牌，拥有 20 多年的有机合成经验

虚拟筛选热门化合物库

货号	名称	简介
L1000	上市药物库	2,272 个上市药物化合物集合，可用于高通量筛选和高内涵筛选。所有化合物得到 FDA、EMA、CFDA 等权威部门审批或收录在 USP、EP、BP、JP、CP 等药典文献中
L1500	GPCR 靶点分子库	1,263 种与 G 蛋白及其耦联受体相关的生物活性小分子化合物，所有小分子都具有良好的生物和药理活性，部分是 FDA 批准的上市药物
L1600	激酶抑制剂库	2,272 个上市药物化合物集合，可用于高通量筛选和高内涵筛选。所有化合物得到 FDA、EMA、CFDA 等权威部门审批或收录在 USP、EP、BP、JP、CP 等药典文献中
L1500	GPCR 靶点分子库	1,339 种激酶抑制剂的独特集合，用于特定靶向激酶，可用于高通量筛选和高内涵筛选
L2000	抑制剂库	3,809 个小分子抑制剂的独特集合，主要用于细胞信号研究、新药筛选、高通量筛选和高内涵筛选
L3400	临床期小分子药物库	1,487 个临床期化合物集合，可用于高通量筛选和高内涵筛选
L4000	经典已知活性库	7,065 个已知活性化合物的集合，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
L4200	FDA 上市药物库	1,403 个 FDA 批准药物的独特集合，提供 FDA 批准编号，是用于药物重定位、新的药物靶点筛选的有效工具
L6000	高通量筛选天然产物库	2,592 种天然产物的独特集合，是药物开发、药理研究、干细胞分化、指纹图谱研究、质量研究等领域的有力工具，可用于 HTS 和 HCS
L9200	药物功能重定位化合物库	3,136 种全球上市药物和临床药物的独特集合，可用于高通量筛选和高内涵筛选，是老药新用、新的药物靶点筛选和细胞诱导的有效工具
DD1000	抗病毒筛选库	针对多种病毒相关靶点进行分子对接筛选、分析现有抗病毒药物药效结构，挑选约 8.7 万种具有抗病毒潜力的化合物。
DD1100	抗肿瘤筛选库	基于现有抗癌化合物和肿瘤相关靶点，通过计算机虚拟筛选及药效结构分析等方法，挑选出约 6.5 万具有潜在抗肿瘤活性的化合物。
DD3100	再生医学靶向库	基于报道化合物和靶点的基础上，通过计算机虚拟筛选和药效结构分析等方法，从 Chemdiv 160 万种类药性化合物中筛选出约 23000 种潜在的再生医学调节剂。
DD3700	300k Representative Compounds Library (Bemis-Murcko Clustering Algorithm)	基于 Bemis-Murcko 骨架分析法挑选具有结构代表性的 30 万类药性化合物，结构多样性更丰富。
DO1100	新农药库	对 5800 余种农药的骨架和药效团等特点进行了详细分析学习，此外还针对多种已报道的靶点进行了分子对接，收集了高潜力、多样性丰富的潜在农药活性小分子
DP1000	PPI 计算机辅助药物设计库	最大的商业化蛋白相互作用筛选库，包含肽模拟物、识别元件、3D 模拟物和大环分子等多种不同类别的 23 万小分子，增加筛选成功率。
DP1700	蛋白激酶抑制剂库	基于报道的激酶抑制剂和激酶靶点，通过计算机虚拟筛选得到约 3.8 万种有成为激酶抑制剂潜力的类药性小分子。
DP2250	CNS MPO 库	通过神经系统药物性质的 MPO 参数评估，筛选出约 3 万种类药性佳、成药潜力高的类药小分子
DP2280	抗衰老库	基于现有抗衰老化合物和相应靶点，通过分子对接和药效结构分析，挑选约 5 万种具有抗衰老潜力的类药性小分子。

* 更多化合物信息请登录官网查询 www.tsbiochem.com

常见问题解答

1. 化合物应该如何寄送？

化合物干粉可常温进行运输，DMSO 溶液可蓝冰运输。寄送后请发邮件通知化合物接受负责人，便于安排节假日的化合物收件。

2. 化合物需要多少用量？

一般体外实验需要 2-3mg。体内实验根据实验具体情况协商送样量。

3. 结果如何发送？

项目根据进展,会进行阶段性的汇报,通过 PPT 的形式发送给客户,并可通过电话会议对结果进行讨论。项目完成以后将以结题报告的 PDF 版本以电子邮件的形式发送给客户。

4. 实验记录的撰写和保存？

我们对所进行的项目按照项目号编号进行管理和实验记录撰写。客户如需原始实验记录，可联系项目负责人将原始记录扫描发送邮箱。原始记录记录本在实验完成后由项目管理部门备案归档保存。

5. 服务项目提供何种报告？

我们实验报告分为英文报告和中文报告两种，报告形式分为电子版和纸质版两种。客户可根据需要选择，默认为电子版中文报告。实验服务项目免费提供中文或英文报告一份，如需中英文报告均酌情收取费用。

6. 如果对检测数据有异议，如何处理？

我们有完整对服务标准和内部数据质控标准，出现检测数据和质控标准冲突对情况，公司免费复测样本，如果检测数据符合质控标准，客户需支付相关费用。