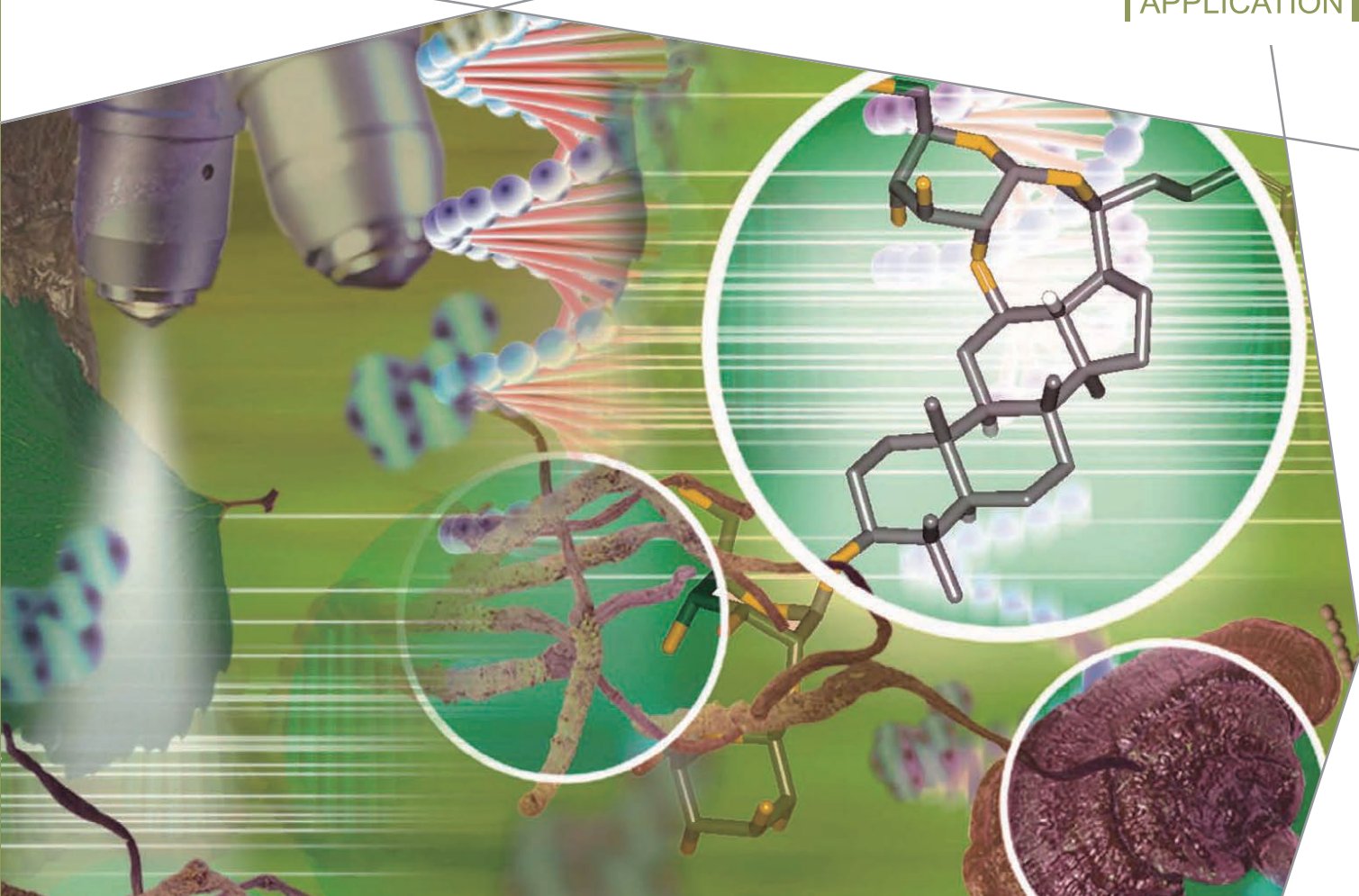




TCMdb

中药化学数据库

AI Driven Innovation&Quality

TCMdb 产品简介

中药化学数据库 (Traditional Chinese Medicines Database, TCMdb) 是中科院过程工程研究所分子设计课题组在长期从事药物设计方法研究的背景下, 对数据库工具的国内外需求进行分析, 经多年努力研制成功的科学数据库产品, 是一个支持新药研发和中药现代化研究的新型工具。

TCMdb 是一个多学科交叉的科学数据库, 涉及中药现代化研究、中药化学、药物化学、植物化学、化学信息学、中药药理学、分子药理学、药物设计学、天然产物研究与开发、新药创制、新剂型中药研发、新农药及其它农用化学品的研发等诸多研究及开发领域。

数据翔实, 表达规范, 检索途径完备
无可代替的中药新产品开发和现代化研究综合信息源

收集化合物 23033 种
涉及中药药用植物 6735 种
使用参考文献 5538 篇 (部)
文献延伸到 2010 年

每种化合物含下列数据: 唯一代码、中文名称、英文名称、CAS 登录号、分子式、分子量、物理化学性质 (晶体形态、熔点、沸点、旋光度等)、格式化的生物活性数据 (即药理模型实验结果)、含有该化合物的中药名单 (部分包括该化合物在原植物中的含量数据)、含完全立体化学信息的结构式和参考文献。

化合物信息举例: 人参皂甙 Rd

ID : 8427

CAS : 52705-93-8

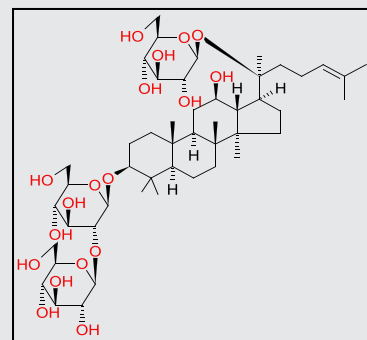
name_cn : 人参皂苷 Rd

name_en : Ginsenoside Rd

MF : C₄₈H₈₂O₁₈

MW : 947.1779

source_plant : 绞股蓝 *Gynostemma pentaphyllum* (叶: 0.009% 干重)[4757], 秦岭珠子参 *Panax japonicus* var. *major*, 人参 *Panax ginseng* [Syn. *Panax schinseng*], 三七花蕾 *Panax pseudo-ginseng* var. *notoginseng* [Syn. *Panax notoginseng*] (花蕾: 0.010% 干重)[4702], 西洋参 *Panax quinquefolium*, 竹节三七 *Panax pseudo-ginseng* var. *japonicus* (地下部分: 0.0018% 干重)[4647].



TCMdb

中药化学数据库

physical_chemical : 白色粉末 (乙醇 : 正丁醇 = 1 : 1), mp 206~209°C, $[\alpha]_{D22} = +19.38^\circ$ (c = 1.03, 甲醇).

other_name : Gypenoside VIII

pharm_avtivity : 抗心律失常 (氯化钡引起的大鼠心律不齐); 抗病毒; 抑制 HSV-1 复制; 抗氧化剂 (大鼠肝脏匀浆, 过氧化氢所致, $IC_{50} = (12.0 \pm 0.8) \mu\text{g/mL}$, FeSO_4 所致, $IC_{50} = (457.5 \pm 15.4) \mu\text{g/mL}$); 11- β -羟甾类脱氢酶抑制剂; cAMP 磷酸二酯酶抑制剂 (in vitro, $IC_{50} = 84 \mu\text{mol/L}$); 促进柔红霉素和长春花碱的细胞毒作用; 促进皮质酮血浆分泌 ($ED_{50} = 112 \mu\text{mol/kg}$); 调节肾功能和抑制肾小球再生; 血管扩张剂; 抗痛觉活性 (i.t. 注射 0.7 μg 物质 -P 诱导的疼痛模型, $EC = 50 \mu\text{g i.t.}$)[5474]; 保肝 (抑制巨噬细胞活化, 抑制 sALT 和 sAST 水平的升高, in vivo, D-GalN/ 脂多糖诱导的小鼠肝损伤, 100mg/kg ip 对 sALT, 抑制率 = 97%; 100mg/kg ip 对 sAST, 抑制率 = 93%; 对照氯化可的松, 20mg/kg ip 对 sALT, 抑制率 = 99%; 20mg/kg ip 对 sAST, 抑制率 = 97%)[4702].

Ref : 4, 87, 451, 900, 4647, 4702, 4757, 5474.

TCMdb 产品特点

8000 种化合物有药理数据 :

200 种细胞水平抗癌模型; 细胞因子网络调节机制抗炎模型; 各种抗氧化模型; 各种酶抑制剂模型; NO 抑制剂模型等等。

信息表达体系完整严格 :

按国际规范全面定义了中英名称、化学结构、各类数值、生物活性等数据结构、层次及格式, 使相关学科信息表达和国际接轨。

保证数据一致性可靠性 :

采用多种交叉验证方法保证信息准确可靠。化合物立体化学表达完整, 并首次实现了药理数据多层次结构规范化。

安装简便易用 :

安装在通用的 ISIS Base 平台上, 在 Windows 环境下运行, 用户检索、浏览和输出方便自如。同时也可方便地和 BIOVIA 等其他分子设计软件相连接。

TCMdb 主要功能和用途

- ◆ 多途径的文字及数据检索功能; 含立体化学的二维结构检索功能。
- ◆ 进行 QSAR 研究的丰富的数据源; 也是用综和方法研究中药现代化的有用工具。
- ◆ 从系统的中草药有效成分结构信息出发, 发现新先导, 进而创制新西药的有用工具。
- ◆ 从中草药资源出发, 研发新剂型等新中药产品的有用工具。
- ◆ 多构象三维结构数据库可直接用于药物设计, 可用来进行基于药效团的三维结构数据库搜寻, 或是进行基于分子对接的数据库搜寻。

从中药设计新西药的有用工具 研发新剂型新中药的必备工具

能回答和中药相关的种种问题，是管理者决策的好参谋！研发者工作的好工具！临床者案头的好帮手！

- 某属 / 种植物中有哪些化学成分已被分离鉴定？都有何种药理活性？
- 有多少化学成分做过抗癌实验，哪些有活性？哪些没有？IC50 值多少？
- 以心血管药物为研发目标的公司应该关注哪些中药的研发动态？
- 从中药出发创制抗高血压新药，哪些资源成功希望最大？
- 开发某种新剂型中药时，从哪些资源出发最有开发前景？
- 已经确定了三维药效团，能否从中药成分中确定先导化合物？
- 有哪些结构类型的化合物具有某种指定药理活性 (1000 多种选项)？
- 黄酮类化合物有多少种药理活性？哪些活性最强？哪些活性谱最广？
- 临床常用某种中药材抗心律失常，其药理学的根据何在？
- 中药传统药效有清热、安神、解表、活血等，对应的药理学概念是什么？

TCMdb 应用实例

◆ 从植物检索化合物

给定一种中药药用植物，问该种植物都含有哪些化合物？严格的说法是：都有哪些化合物被从该种植物中分离并进行了结构确定？TCMdb 数据库能方便地完成这个任务。以三七为例，单击菜单栏下方的“Query”按钮，在 query 模式下激活“植物来源”域，键入“Like “% 三七 %””时，单击菜单栏“Search”按钮，单击下拉菜单中的“By Form”，系统将扩展地检出各种三七中含有的全部化合物，包括竹节三七等。

类别	方式	检索域	键入	命中数	注解及说明
单项	SBF	植物来源	Like “% 人参 %”	187	检出各种人参中含有的全部化合物
单项	SBF	植物来源	Like “% 三七 %”	161	检出各种三七中含有的全部化合物，注意包括竹节三七等

◆ 化合物药理活性数据检索

在全库的 23033 种化合物中，8000 种化合物有药理活性数据。这是研究 QSAR/SAR 关系的珍贵信息。用 SBF 方式，激活“药理活性”域后，键入“Like “% 药理关键字 %””，之后单击菜单栏“Search”按钮，单击下拉菜单中的“By Form”，就得到下表中的结果。亦可采用 QB 方式，见下表中中间三个例子：

类别	方式	检索域	键入	命中数	注解及说明
单项	SBF	药理活性	Like "% 金黄色葡萄球菌 %"	433	433 个化合物有抗金黄色葡萄球菌数据
单项	SBF	药理活性	Like "% 细胞毒 %"	2523	2523 个化合物有体外抗肿瘤数据
单项	QB	药理活性	Activities like "% 抗肿瘤 %"	637	637 个化合物有体内抗肿瘤数据
单项	QB	药理活性	Activities like "% 抗高血压 %"	219	219 个化合物有抗高血压数据
单项	QB	药理活性	Activities like "% 抗肿瘤 %" or Activities like "% 细胞毒 %"	2920	2920 个化合物有体外或体内抗癌数据
单项	SBF	药理活性	Like "% 抗疟 %"	250	250 个化合物有抗疟数据

注意：体外抗癌活性在库中的规范表达方式是“细胞毒”，体内抗癌活性在库中的规范表达方式是“抗肿瘤”。观察化合物生物活性索引中的生物活性规范表达方式对于熟练使用数据库是有好处的。

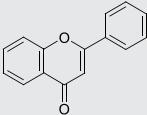
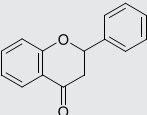
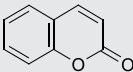
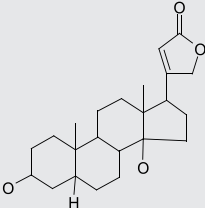
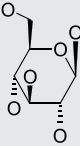
◆ 抑制剂及其药理模型检索

用 SBF 方式，激活“药理活性”域，键入“like "% 抑制剂 %"”命令，单击菜单栏“Search”按钮，单击下拉菜单中的“By Form”，检出各种抑制剂 1724 种。进一步用子库查询方法，可检出特指的抑制剂，如血小板聚集抑制剂 242 种。再进一步，用子库查询方法可检出不同的药理模型的数据，如能抑制花生四烯酸诱导的血小板聚集的化合物 95 种，能抑制胶原诱导的血小板聚集的化合物 75 种，等，详见下表：

类别	方式	检索域	键入	命中数	注解及说明
单项	SBF	药理活性	like "% 抑制剂 %"	1724	检出各种抑制剂 1724 种
单项	SBF , current list	药理活性	like "% 醛糖还原酶抑制剂 %"	93	检出醛糖还原酶抑制剂 93 种
单项	SBF , current list	药理活性	like "% 血小板聚集抑制剂 %"	242	检出血小板聚集抑制剂 242 种
子库查询	SBF , current list	药理活性	like "% 花生四烯酸 %"	92	其中花生四烯酸诱导的 92 种
子库查询	SBF , current list	药理活性	like "% 胶原 %"	74	其中胶原诱导的 74 种
子库查询	SBF , current list	药理活性	like "%PAF%"	58	其中 PAF 诱导的 58 种
子库查询	SBF , current list	药理活性	like "% 凝血酶 %"	57	其中凝血酶诱导的 57 种

◆ 结构检索

结构及子结构检索是 TCMdb 特有的功能。这一功能的实现对进行 QSAR 研究，进而研发新药提供了巨大的帮助。这里只举出最简单的例子：将黄酮类化合物的特征分子骨架放入 SBF 方式下的 structure 检索域，从库中检出包含黄酮骨架的化合物 1101 个。用 β -D-葡萄糖的分子骨架（含确切的立体化学信息）提问，得到 4438 个命中化合物。其它例子见下表：

类别	方式	检索域	键入	命中数	注解及说明
单项	SBF	二维结构		1101	黄酮类化合物 1101 个
单项	SBF	二维结构		432	二氢黄酮类化合物 432 个
单项	SBF	二维结构		566	香豆素类化合物 566 个
单项	SBF	二维结构		79	洋地黄毒强心甙 79 个
单项	SBF	二维结构		4438	含 β -D-葡萄糖化合物 4438 个

TCMdb 用户评价

继中文专著——《中药原植物化学成分集》三卷本 (ISBN978-7-03-023553-4) 由科学出版社于 2009 年出版以后，与本数据库内容完全匹配的最新英文专著——六卷本《中药大全—分子结构, 药理活性, 天然来源及应用》(《Encyclopedia of Traditional Chinese medicines Molecular Structures, Pharmacological Activities, Natural Sources and Applications》, Vol 1~Vol 6, ISBN978-3-642-16734-8) 已于 2011 年由 Springer 出版社在全球发行。但文字 / 数值 / 结构复合型数据库具有任何纸质书本不可能具有的强大检索功能，和《中药原植物化学成分集》配合使用，相得益彰，是完美的结合。

国内中医、中药、药理专家对《中药原植物化学成分集》一书的评论摘要：

“该书为中药的现代化研究搭建了一个很好的信息平台，达到了国际上同类工作的先进水平”

——（医科院药用植物所肖培根院士）

“该书内容丰富，资料完整，反映了国内外最新研究成果，对于充分利用我国中药资源，促进中药现代化研究，提升我国创新药物研究水平，具有重要的科学价值”

——（中国药理学会杜冠华理事长）

“该书为用综合方法系统研究中药首次提供了一套两万种以上中药化学成分的数据集合，在理论层面上对临床实践有重要参考价值”。

——（中医科学院翁维良首席研究员）



创腾科技专注于生命科学和材料科学领域信息化的开拓与创新。通过AI及移动互联技术，我们为
广大用户提供：计算模拟与数据建模、科研创新
及质量合规等全方位的信息化解决方案，全面提
升企业的研发效能和数字化转型价值。

在中国已有千余家生命科学和材料科学领域的机
构选择了创腾科技的产品和服务，包括国内知名
的制药企业、新药研发合同服务企业、石化企业
以及高校、科研院所。

创腾科技有限公司

NeoTrident Technology LTD.

北京办公室

北京市中关村科学院南路2号融科资讯
中心C座南楼1512室 (100190)
电话：+86 010 82676188
传真：+86 010 82677178

广州办公室

广州市天河区黄埔大道西33号
三新大厦16-E房 (510620)
电话：+86 020 88527961

上海办公室

上海市浦东新区张江达尔文路88号
半岛科技园11栋4楼 (201203)
电话：+86 021 51821768
传真：+86 021 51821758

成都办公室

成都市锦江区东御街19号
茂业天地A栋33楼3308号 (610000)
电话：+86 028 66319683

苏州办公室

江苏省苏州市工业园区东长路88号
2.5产业园A2栋301室 (215028)
电话：+86 0512 67509707
传真：+86 0512 67509725

创腾官网：www.neotrident.com

创腾学院：training.neotrident.com



官方微信