

药物功能重定位

DRUG REPURPOSING



INHIBITORS &
AGONISTS



COMPOUND
LIBRARIES



RECOMBINANT
PROTEINS



NATURAL
PRODUCTS



TECHNICAL
SERVICE

REPOSITION

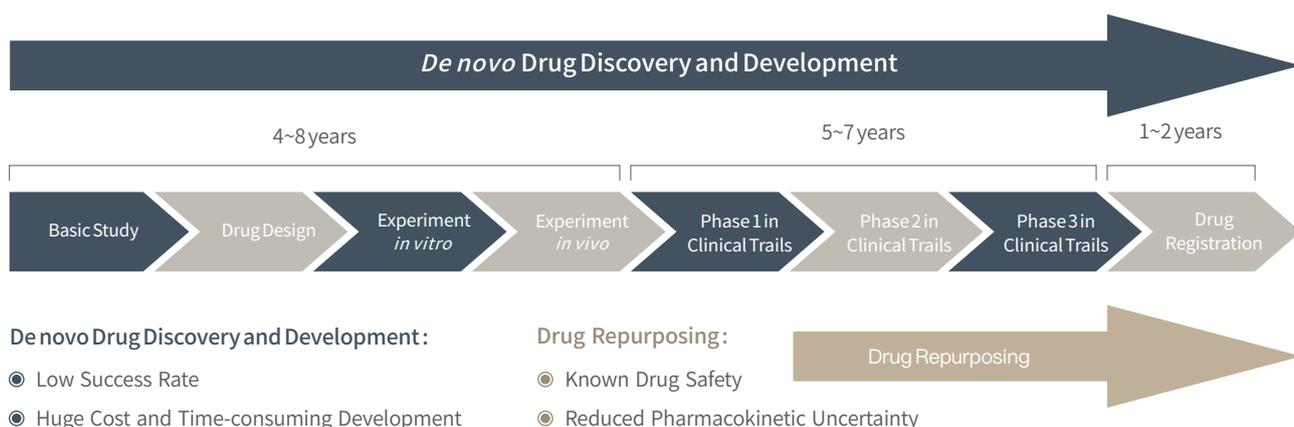
药物功能重定位介绍

Drug Repurposing

药物功能重定位，也称老药新用，是一种用于发现老药或在研药物超出原始批准的适应症，扩大其适用范围和用途的策略。新药研发是一个高失败率、高成本且缓慢的过程，而药物功能重定位具有研发成本低、开发时间短的优点，所以重利用老药来治疗常见和罕见的疾病变得越来越有吸引力。

比如双硫仑（DSF）作为一种已被美国食品和药品管理局（FDA）批准 60 多年的戒酒药物，具有廉价、毒副反应小等特点。近年来的研究证实具有明显的抗肿瘤作用，机制包括抑制肿瘤干细胞、诱导肿瘤细胞凋亡、抑制蛋白酶体、诱导细胞周期阻滞、抑制肿瘤血管生成、增加放疗敏感性、逆转肿瘤细胞耐药性。目前，关于双硫仑抗非小细胞肺癌、胰腺癌都已经进入临床阶段。

再如二甲双胍原本是用于治疗 2 型糖尿病的一种主要药物，但近年来这一药物似乎有成为“神药”之趋势，因为除了降糖作用，多项研究还发现其具有治疗心血管疾病、抗肿瘤、抗感染、抗炎、抗衰老等作用。



REPOSITION

药物功能重定位优势

Drug Repurposing

01

失败风险较低： 如果该药已完成早期试验，就证明它在临床模型和人体中是安全的，那么至少从安全性的角度来看，它在随后的功效试验中失败的风险较小。

02

缩短研发时间： 一个新药推向市场一般需要 13~15 年，而药物功能重定位研发周期甚至可缩减至一半，因为大多数的临床前测试、安全性评估以及某些情况下的制剂开发已经完成。

03

所需投资较少： 尽管药物重定位的发展阶段和过程的不同会导致投资差异较大；但是，药物重定位仍然可以在临床前、临床 I 期和临床 II 期阶段节省一大笔费用。

这些优势加在一起，说明药物重定位能降低新药开发的风险，且投资回报快；如果失败，平均成本也会降低。实际上，一个药物重定位的成本估计为 3 亿美元，而开发一个新的化学实体药物需要 20 到 30 亿美元。最后，药物重定位还能揭示可以进一步研究的新靶点和新通路。

我们的优势

Our Advantages



产品种类丰富

我们的产品种类丰富,涵盖了多个研究领域,包括但不限于超过 20,000 种活性小分子、多肽、抗体抑制剂、染料试剂、PROTAC 产品、重组蛋白以及细胞实验常用试剂盒等产品现货供应;可提供了 800 多种规模多样的小分子化合物库,以满足不同研究需求。



信息数据详实

基于大量文献及各类数据库支撑,化合物(库)具有丰富详细的生物学及结构信息,确保数据的准确完整性。



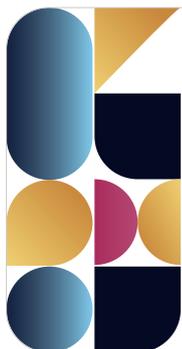
严格质量保证

我们坚持高标准的质量控制,NMR、HPLC/LCMS等多种检测技术保证产品结构正确,确保提供的化合物具有高纯度和高质量,为研究提供可靠的实验基础。



优质专业服务

我们拥有经验丰富的技术团队,全程提供专业的技术支持。



WINNER

TARGETMOL

BIOCHEMICAL SUPPLIER TO WATCH IN 2023



CiteAb

Target Molecule Corp.

抑制剂 & 激动剂 | 化合物库 | 天然产物 | 重组蛋白 | 技术服务

400-820-0310

www.targetmol.cn

sales@targetmol.cn



关注公众号
获取更多信息



订分享积分
积分兑换好礼

TargetMol®所有产品和服务仅用于科学研究,不能被用于人体,我们不向个人提供产品和服务。

REPOSITION 药物功能重定位举例

Drug Repurposing

阿司匹林, 又称乙酰水杨酸, 它源自柳树入药的古老历史, 19 世纪中叶从绣线菊提取乙酰水杨酸, 进入医学界。20 世纪末, 科学家发现其抗凝机制, 经历巨变。阿司匹林最初作为解热镇痛药广泛用于感冒、头痛等。1950 年, 发现其可能预防心肌梗死。1982 年, 发现其抑制血小板聚集机制, 并因此获诺贝尔奖。

编号	名称	原用途	新用途
T0005	阿司匹林	止痛	抗风湿, 预防癌症、抗心血管疾病
T0054	双硫仑	戒酒药物	抗肿瘤
T0213	沙利度胺	镇静剂	抗麻风病和治疗多发性黑色素瘤
T0968	紫杉醇	植物抗癌药	抗冠状动脉狭窄、抗肝/肾组织纤维化、神经轴突细胞再生和保肢手术
T1537	雷帕霉素	免疫抑制剂	淋巴管肌瘤病
T4006	喷司他丁	白血病治疗药	毛细胞白血病治疗剂
T8526	二甲双胍	糖尿病	抗癌, 抗衰老等
T77798	亚硝酸钠	氰化物中毒解毒剂	慢性腿部溃疡引起的镰状细胞贫血症及其它血液病

REPOSITION 药物功能重定位化合物库

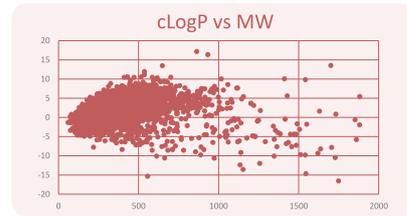
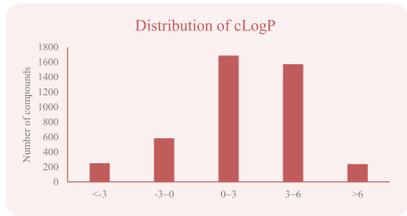
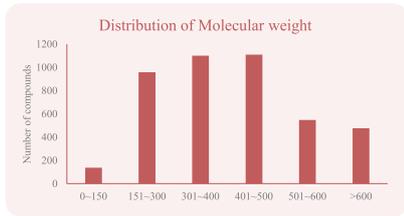
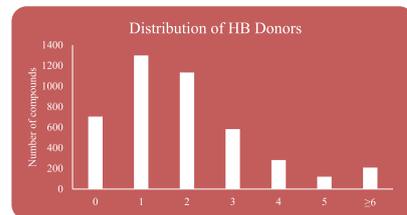
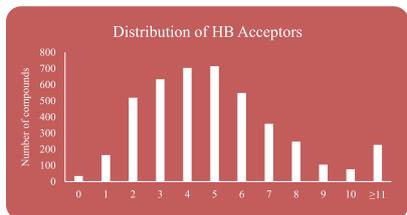
Drug Repurposing Compound Library

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。

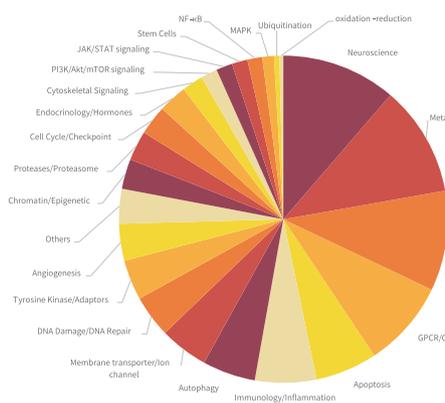
TargetMol 药物功能重定位化合物库收集了 4630 种已上市和进入临床期的药物, 这些化合物经过大量的临床前研究实验, 具有活性高、毒性低和机制明确的特点, 适用于药物筛选的同时, 也是细胞诱导分化的有力工具。

- 4630 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。
- 整个行业规模领先的药物功能重定位化合物库;
- 所有上市化合物得到 FDA、EMA、NMPA 等权威部门审批;
- 涵盖多个研究领域: 肿瘤、心血管药物、抗炎/免疫、神经系统药物、呼吸系统药物等;
- 靶点多样: 包括 5-HT Receptor、Sodium Channel、p38 MAPK、PI3K、MEK 等;
- 详细的说明书, 化合物结构、靶点信息、适应症信息、活性描述等;
- 结构多样, 药效显著, 可渗透细胞;
- 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。

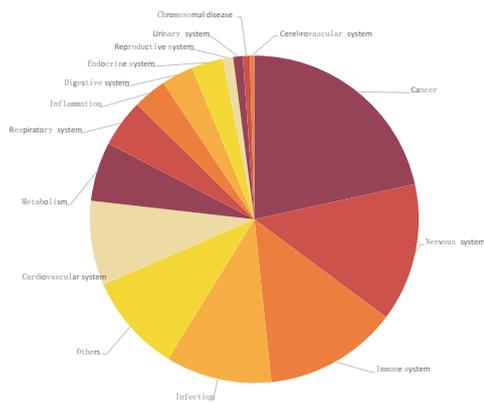
Compounds Compliant With Lipinski's Rules	
PhysChem Properties	% Compounds
Hbond donors <5	92%
HBond acceptors <10	93%
cLogP<5	88%
MW<500	76%



类药性参数分析



信号通路组成



涉及的研究领域

药物功能重定位相关化合物库

Drug Repurposing

编号	名称	数量	应用
L4010	已知活性库	25000+	25000+ 已知活性化合物的集合, 可用于高通量筛选、高内涵筛选、细胞诱导和靶点确认。
L1000	上市药物库	2800+	2800+ 上市药物化合物集合, 可用于高通量筛选和高内涵筛选。
L4200	FDA 上市药物库	1700+	1700+ FDA 批准药物的独特集合, 可用于高通量筛选和高内涵筛选。
L1010	FDA 上市及药典收录分子库	3000+	3000+ 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。
L4210	NMPA 中国上市药物库	1000+	1000+ NMPA 批准药物的独特集合; 提供 NMPA 批准编号, 用于药物重定位、新的药物靶点筛选的有效工具。

编号	名称	数量	应用
L3410	临床前化合物库	700+	700+ 临床前小分子化合物的特有集合, 拥有明确的靶点信息; 有详细的临床分期和适应症信息; 用于高通量、高内涵筛选。
L2110	抗癌上市药物库	1700+	1700+ 具有抗癌活性小分子的独特集合, 所有化合物都经过了严格的临床前研究和临床试验, 由 FDA、EMA 或 NMPA 等机构批准上市, 可用于高通量、高内涵筛选。
L4000	经典已知活性库	17000+	17000+ 已知活性化合物的集合, 可用于高通量筛选、高内涵筛选、细胞诱导和靶点确认。
L1610	FDA上市激酶库	200+	200+ 靶向激酶的上市药物集合, 用于特定靶向激酶, 可用于高通量筛选和高内涵筛选。
L1600	激酶抑制剂库	2700+	2700+ 激酶抑制剂/调节剂的独特集合, 用于特定靶向激酶, 可用于高通量筛选和高内涵筛选。
L2100	抗癌化合物库	7000+	7000+ 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。
L1200	表观遗传库	900+	900+ 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。
D7800	新颖已知活性库	8000+	8000+ 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, 可用于高通量、高内涵筛选。
LF7400	已知活性化合物库 Plus2	5000+	国内备有现货产品, 包含 5000+ 化合物, 货期更短, 性价比更高。
L3400	临床期小分子药物库	3400+	3400+ 临床期化合物集合, 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; 可用于高通量筛选和高内涵筛选。

我们可提供的产品、技术服务

Product & Services

— ...



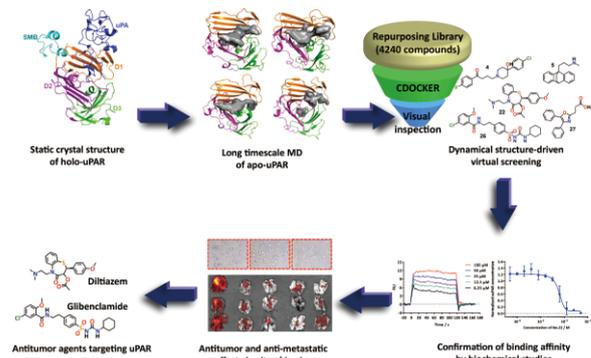
应用案例

Application Cases

Journal of Medicinal Chemistry, 2023, 66(8): 5415-5426

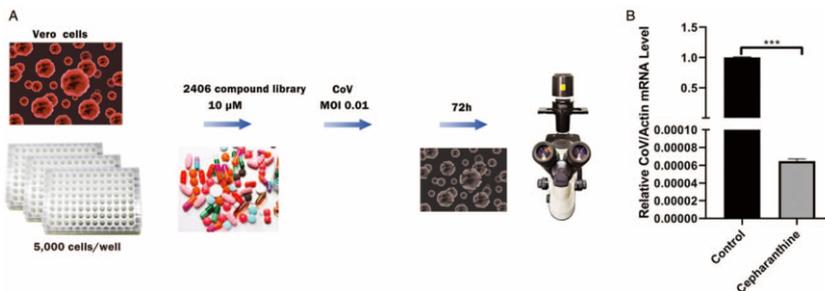
作者以 urokinase receptor (uPAR) 为靶标, 通过结构动力学驱动的虚拟筛选 (TargetMol-L9200 药物功能重定位化合物库 - 4240 个化合物), 发现了 Diltiazem 和 Glibenclamide 两种药物潜在的抗肿瘤和抗转移作用。

Virtual Screening of Small-Molecule Compounds Intervening with the uPA-uPAR Interaction. Based on the most representative structures of the four dominant clusters of apo-uPAR obtained from the above long-timescale MD simulation, we performed a multiple docking-based virtual screening against the **TargetMol Drug Repurposing Compound Library L9200** (including 4,240 compounds, <https://www.targetmol.com/all-compound-libraries>) using the CDOCKER module implemented in Discovery Studio 2017 R2 Client. The consensus analysis was performed on seven different scoring functions (Figure S2A and see **Additional Experimental Section** in Supporting Information for details).



Chinese medical journal, 2020, 133(09): 1051-1056

作者通过筛选 TargetMol-L1000 上市药物库与 L1700 抗病毒库, 发现了老药千金藤素 (cepharanthine) 具有超强的抗新冠病毒 2019-nCoV 活性, 10 μ M 的千金藤素抑制冠状病毒复制的倍数为 15,393 倍, 并获得国家专利。



smuggled pangolin in 2017, and its complete genome has been submitted to GenBank.^[7] **A library of 2080 approved drugs (catalog No. L1000) and a library of 326 anti-virus compounds (catalog No. L1700) produced by TargetMol were purchased from Topscience (Shanghai, China).** Oligonucleotides used in the study can be found in

