



CNPD

中国天然产物数据库

Solutions for Innovation.

信息化建设领导者

CNPD

中国天然产物数据库

CNPD™ 产品简介

中国传统中草药的应用已有几千年历史，医药行业对天然产物进行系统地分离和研究也经历了二百多年的历程，从中草药中寻找有效成份，进而发现有潜力的先导化合物或新药已成为目前新药研究与开发的一个热门领域。中国科学家早在二十世纪三十年代就从研究中国传统的中药及民间行之有效的民间药入手，利用现代手段对中草药开展了化学、生物学和药理学研究。通过对中草药天然产物的提取分离，结构鉴定和结构改造，不但创造出来源于中草药又优于其母体结构的先导化合物和新药，并且积累了大量具有很高科学与应用价值的信息资源。系统地收集、整理和分析这些信息资源，无疑将对天然产物、新药及相关领域的研究起着重要的作用。

中国天然产物数据库 [Chinese Natural Product Database (CNPD™)] 是创腾科技有限公司和中国科学院上海药物研究所联合开发的综合性天然产物数据库。这一数据库是在 ISIS 化学信息管理系统的基礎上建立并完成的。ISIS 化学信息管理系统是目前国际通用的管理系统，使用方便，兼容性好。

CNPD™ 是面向相关领域的科学家建立的易于使用的综合性天然产物数据库系统，该产品力图系统的收集、整理、分析从中国国产的植物中分离鉴定出的天然产物的物理性质、生物活性及化学结构等信息，结合中国传统中草药的应用实践，利用最先进的计算机化学信息管理手段，为中国的新药、天然产物及相关领域的研究与开发工作，提供一个不可多得的好工具。

CNPD™——物有所值的天然产物数据库

CNPD™ 数据库包括两方面内容：一是库管理系统，二是数据本身。

CNPD™ 数据库的一个重要方面是管理系统。CNPD™ 的数据库是利用先进的化学信息管理系统 ISIS/Base & Draw 进行数据管理，可以方便地连接其他应用系统如 BIOVIA 所提供的分子模拟和分子设计软件系统 Discovery Studio。ISIS/Base & Draw 在 Windows 环境下运行，使用者无需任何专业计算机知识，不需学习任何编程语言，即可利用 ISIS/Base & Draw 对 CNPD™ 数据库自如地进行检索、浏览和维护。更重要的是，使用者在使用 ISIS/Base & Draw 对 CNPD™ 数据库进行检索时，还可以使用到一种非常有效的新功能结构式搜寻。化学结构式是化学家的通用语言，当化学家利用结构式搜寻功能对 CNPD™ 数据库进行检索时，可以非常准确的得到他们所需的信息。

CNPD™ 数据库的另一个重要内容便是数据本身。CNPD™ 目前共收集了**五万七千多个**天然产物，涵盖天然产物的三十七个类别。而且类药性分析结果标明，CNPD™ 中有 70% 的分子是类药性分子。

生物碱	alkaloid	氨基糖甙	aminoglycoside
甙	glycoside	肽	peptide
黄酮	flavonoid	多糖	polysaccharide
蒽醌	anthraquinone	核苷	nucleoside
菲醌	phenanthraquinone	多烯	polyene
萘醌	naphthoquinone	二烯	diene
苯醌	benzoquinone	糖	saccharide
苯并呋喃	benzofuran	聚醚	polyether
苯并吡喃	benzopyran	脂环	alicyclics
木脂素	lignans	杂环	heterocycle
强心甙	cardiac glycoside	大环内酯	macrolide
萜烯	terpene	单宁	tannin
倍半萜	sesquiterpenoid	酚	phenol
二萜	diterpenoid	酸	acid
三萜	triterpenoid	苯甲酸	benzoic acid
单萜	monoterpenoid	甾体	steroid
香豆素	coumarin	甾体皂甙	steroidal saponin
芪(二苯乙烯)	stilbene	其他	other

同时 CNPD™ 还收集了天然产物相关的各类信息，主要包括：

- 天然产物的二维分子结构及三维分子结构。三维分子结构是利用分子力学方法优化得到的。导出的三维分子结构不仅可以进行针对药物靶标的虚拟筛选，而且可以将三维分子结构与生物活性资料相结合，来探索分子结构和活性间的相互关系。
- 天然产物的名称、分子式、分子量、熔点、旋光度等重要理化性质。
- 天然产物的 CAS 登录号。CAS 登录号可以作为与其它化学信息资源关联的便捷接口。
- 一些天然产物的生物活性信息及其参考文献。包括文献来源、作者、年代等详细信息。
- 天然产物的自然来源及其参考文献。包括文献来源、作者、年代等详细信息。
- 原植物或其同属中药在中国传统医药中的应用。包括中文名，拉丁文名，性味，归经及功用主治等。

CNPD™ 的应用

CNPD™ 可以为从事药物化学、植物化学、有机化学、医药、农药及生物化学等领域的研究人员提供有益的帮助，例如：

- 帮助研究人员系统的了解天然产物分离、提取和鉴定的研究方法。
- 对天然产物的结构及生物活性信息进行定量或定性的分析研究，深入了解某类药物的结构与活性之间的关系，为新药研究提供系统的和有价值的信息。
- 通过虚拟筛选方法筛选天然产物数据库 CNPD™ 也是获得先导化合物或活性化合物的一条有效途径。
- 由于天然产物的结构具有非常好的差异性，因此天然产物数据库中的许多化合物可以作为组合化学库设计的起始结构。
- CNPD™ 首次将天然产物、生物活性数据、原植物来源及中药传统应用融合在一起，并且提供三维结构信息，所以它可以帮助科研人员充分了解中国天然产物资源。

因此，在中国的新药、天然产物及相关领域的研究与开发工作中，CNPD™ 是一个不可多得的好工具。

升级 / 补充

中国科学家在对天然产物及中草药的研究中积累了大量的信息资源。CNPD™ 将通过版本升级来充实和完善数据库，包括新条目的补充以及条目内容的增加、更新等。最新版的 CNPD™ 中还增加用于虚拟筛选的三维结构数据库，为用户在使用其他的分子模拟和设计软件系统方面提供更多的方便。

Solutions for Innovation.

信息化建设领导者



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 10 82676188 传真：+86 10 82677178

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 21 51821768 传真：+86 21 51821758

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：+86 512 67509707 传真：+86 516 67509705

创腾官网：www.neotrident.com

创腾学院：training.neotrident.com