



国家新药筛选中心化合物的结构要求

(免费/合作筛选)

合乎筛选要求的化合物

- ✓ 普遍要求：分子量介于175和800之间的固体有机化合物
- ✓ 杂环和稠（杂）环
- ✓ 饱和非芳香性杂环：需带有两个或以上取代基团
- ✓ 桥连双环化合物：二环可全部由碳原子组成，或含有氧、硫、氮原子；带有两个或以上取代基团。
- ✓ 天然产物及其衍生物：分离得到，或合成的。

不合乎筛选要求的化合物

- ✧ 液体
- ✧ 分子量小于175或大于800
- ✧ 不稳定或水/光敏感的化合物
- ✧ 聚合物
- ✧ 无机物
- ✧ 不含杂原子的化合物
- ✧ 多核芳香烃
- ✧ 含有重金属（Hg, Pb, As, Sn, Cr等）的有机物
- ✧ 氧-硅烷基化合物
- ✧ 脲
- ✧ 亚胺
- ✧ 吡啶
- ✧ 吡喃鎓盐
- ✧ 冠醚
- ✧ 磷酰卤
- ✧ 三烷基膦
- ✧ 西弗碱类化合物
- ✧ 二硫化物（非环状）
- ✧ 硫酯
- ✧ 简单（硫）脲（分子量小于350）
- ✧ 高氯酸盐，高碘酸盐
- ✧ 全卤代芳香族化合物
- ✧ 环氧化物
- ✧ 酰氯
- ✧ 酞
- ✧ 异（硫）氰酸酯（盐）
- ✧ 反应活性醌类
- ✧ 叠氮化物，重氮盐，偶氮苯
- ✧ 胍
- ✧ 氮-氧化物
- ✧ 亚硝基化合物
- ✧ 氮-卤化物