

智能创新带动卓越品质 · 基于云计算和人工智能



iLabPower

化合物管理系统

---

iLabPower CMS

建立化学创新药研发机构的  
私有化合物知识库

# iLabPower CMS

## 化合物管理系统

### ► 化合物管理

研发过程产生的化合物相关数据作为化学新药研发机构的宝贵财富,在管理过程中,您是否正在被如下难题所困扰——



- 纸质记录不规范,关键结果信息易遗漏,数据质量不高,可传承性差



- 合成数据、分析图谱、生测数据分散存储,信息可追溯性差,无法转化为知识



- 历史化合物数据查询不方便,难以重复利用,效率低



- 部门间协作不便,人员变动导致知识流失

### ► 面临的挑战

化学新药研发机构在研发过程中产生的化合物相关数据,是研究机构和企业的宝贵财富,同时也是研究机构和企业研究水平和核心竞争力的体现。因此如何对这些数据进行有效的积累和管理,尽早建立规范合理的信息平台,是每个研究机构和企业必须面对的重要课题。如果企业或研发机构的化合物信息管理仍停留在传统手工管理的层次上,必然会导致出现一些信息交流或管理方面的瓶颈和阻碍。



# iLabPower CMS

► 通过使用iLabPower CMS短期内您将可以实现：



► 带来的收益

■ 科研人员

B/S架构, 支持批量导入导出, 简便快捷;  
查询方便, 数据利用率大大提升;  
化合物数据与生物数据统一管理;



■ 管理人员

化合物信息管理规范化;  
权限设置灵活, 系统保密性强;  
多维度数据综合查询, 实时掌握研  
发项目进展;  
方便不同部门的协作;



■ 企业

方便进行后续的数据分析和挖  
掘工作, 让数据发挥价值;  
形成企业核心知识库;  
提升企业创新能力;



# iLabPower CMS

## ► 化学创新药研发机构化合物筛选成果管理平台

iLabPower CMS化合物管理系统依托创腾10余年的行业理解、历经国内诸多知名企业的效果印证，将新药研发企业最重要的知识成果——化合物，进行全方位信息存储及筛选管理。可实现对项目信息、化学信息、样品信息、生测信息、反应路线等化合物研发数据的一站式集中管理；可提供便捷且多维度的数据检索和对比查询。系统可灵活配置审批流程，并按流程严格执行相关数据和信息的审批发布，为化学制药研发机构建立规范的私有化合物知识库。

### ■ 一站式化合物信息管理, 规范便捷

- 支持多语言切换，满足不同语言需求
- 数据批量导入/导出，快捷高效
- 支持项目信息维护、项目审批，可与项目管理系统iLabPower PM集成，直接读取项目信息
- 唯一性检测，严格的审批流程设置，保证数据的可靠性
- 与电子实验记录本iLabPower EDM集成，化合物一键注册至CMS

### ■ 成熟的化学及生物数据模板

可满足对化学信息、样品信息、谱图信息、合成路径以及体外筛选/评价、体内药效/药代等生物测试数据的一站式管理。



#### ■ 高度灵活的模板管理

- 支持灵活配置多类型模板，包括方法模板、化合物模板、样品模板、送样模板等
- 模板配置简单灵活，还可根据需求进行自定义搭建

#### ■ 高效的协作任务管理

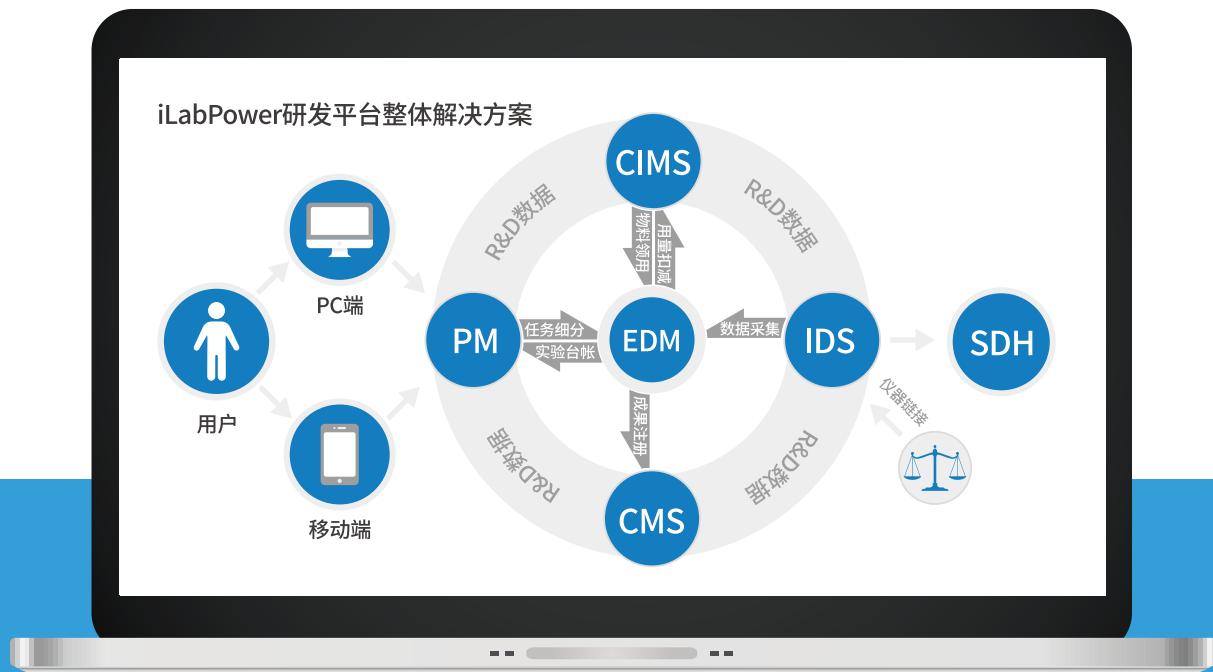
合成部门与测试部门信息自动流转，包括建立测试任务、提交审批、测试任务分配、测试样品接收，生物测试结果录入等全流程的规范化、标准化管理，提升协作效率与数据质量。

#### ■ 综合查询管理

支持多种检索方式（包括精确查询），帮助科学家快速精准决策。

## ■ 统一平台

iLabPower CMS系统是iLabPower研发创新数字化平台的有机组成部分,既可独立使用,也可根据需要与平台内其他模块(例如电子实验记录本iLabPower EDM、以及研发项目管理系统iLabPower PM)实现功能对接。



- **PM:** 研发项目管理系统
- **CIMS:** 实验室物资管理系统
- **EDM:** 电子实验记录本
- **CMS:** 化合物管理系统
- **IDS:** 仪器生命周期管理系统
- **SDH:** 科学数据基因组平台

# iLabPower CMS

iLabPower数字化研发整体解决方案旨在通过统一的基础架构平台iLabPower, 将研发过程中所需的各个功能模块进行有效的整合和集成, 确保研发数据间的无缝流通, 避免“数据孤岛”, 从而大幅降低实验室全面数字化过程中的风险与成本投入。



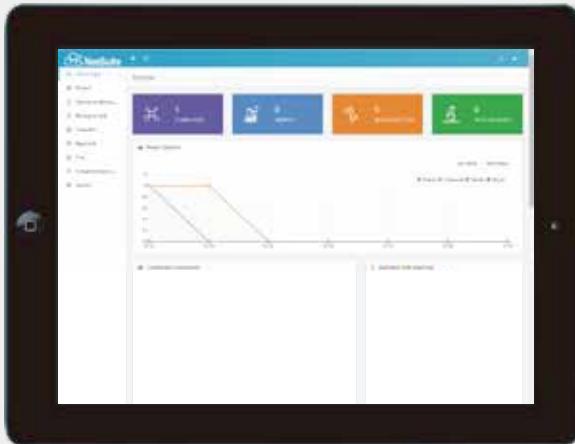
# iLabPower CMS

## ► 主要功能模块

iLabPower CMS 化合物管理系统包括“首页”、“项目管理”、“化学信息”、“测试信息”、“模板管理”、“我的审批”、“测试任务管理”、“综合查询”和“系统管理功能”等功能模块，为企业提供规范的化合物管理流程。

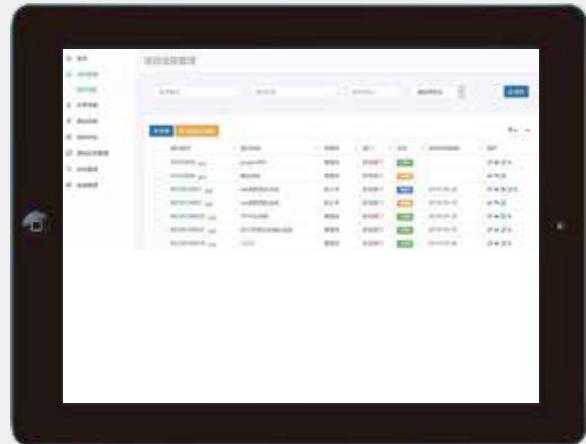
### ■ 首页

系统支持多语言切换，首页提供项目信息，化合物信息，测试信息的仪表盘以及审批信息，研发人员登录后可随时了解项目的最新进展。



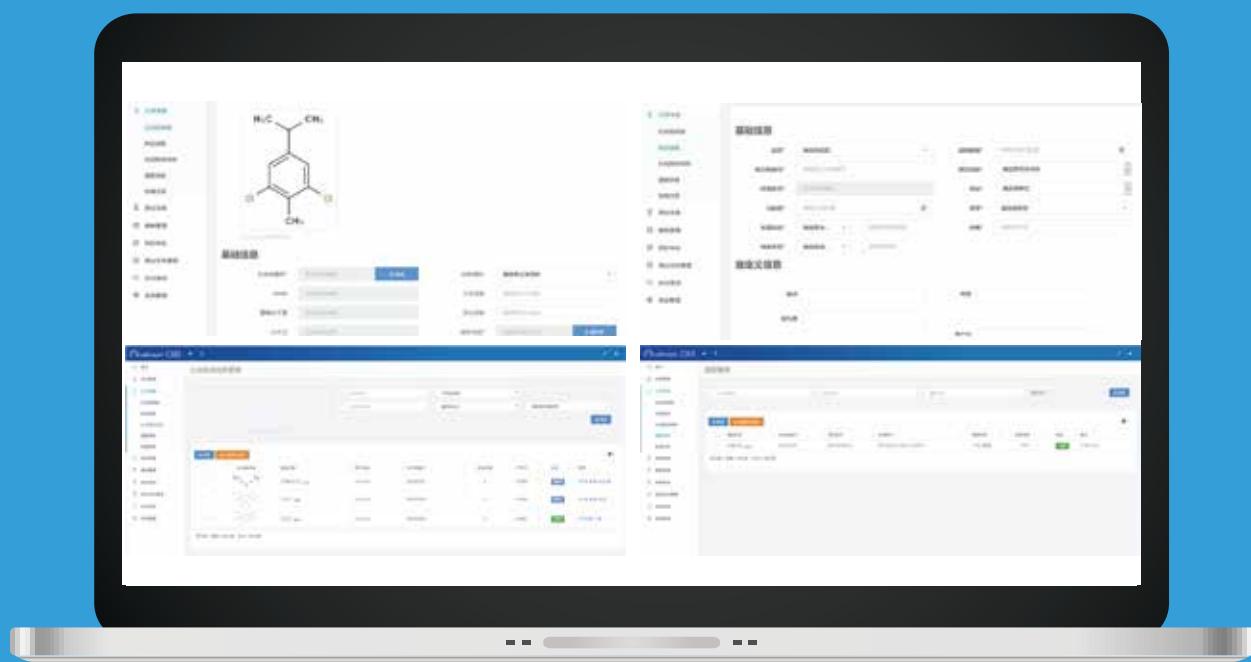
### ■ 项目信息管理

系统提供了项目信息维护的功能，本身与项目管理系统PM在统一的iLabPower平台下，也可以直接读取PM中的项目信息。



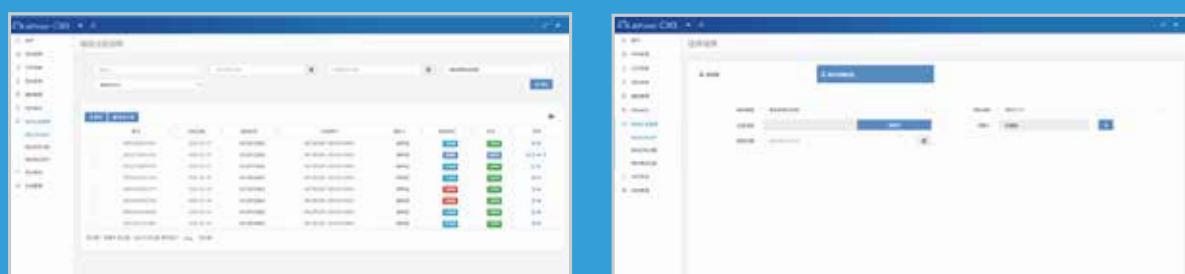
## ■ 化学信息管理

化学信息包括了化合物信息，样品信息、合成路线和谱图信息的编辑和查询功能，允许化学家对化学信息进行整体管理。系统支持批量导入功能、提高数据录入效率。支持化合物结构查重功能，并支持自定义审批流程，以保证化学信息的规范有效。系统支持快速注册，并与实验数据管理系统iLabPower EDM无缝集成，可以从实验记录中提取有效化学信息，实现一键注册至CMS系统中。



## ■ 测试任务管理

测试任务管理包括新建测试任务，提交审批，测试任务分配，测试样品接收和生物测试结果录入功能。可让合成化学家和生测科学家的合作变的更加畅通，研发效率更高。所有的测试请求均可在送样模板中进行标准化管理，保证信息的规范性和有效性。



## ■ 模板管理

系统支持灵活配置多类型的模板，包括方法模板、化合物模板、样品模板、送样模板等。模板配置操作简便，无需IT背景，直接拖拽模块即可完成模板的配置。可以根据企业的模板需求进行自定义配置和修改，保证数据的规范化和标准化。

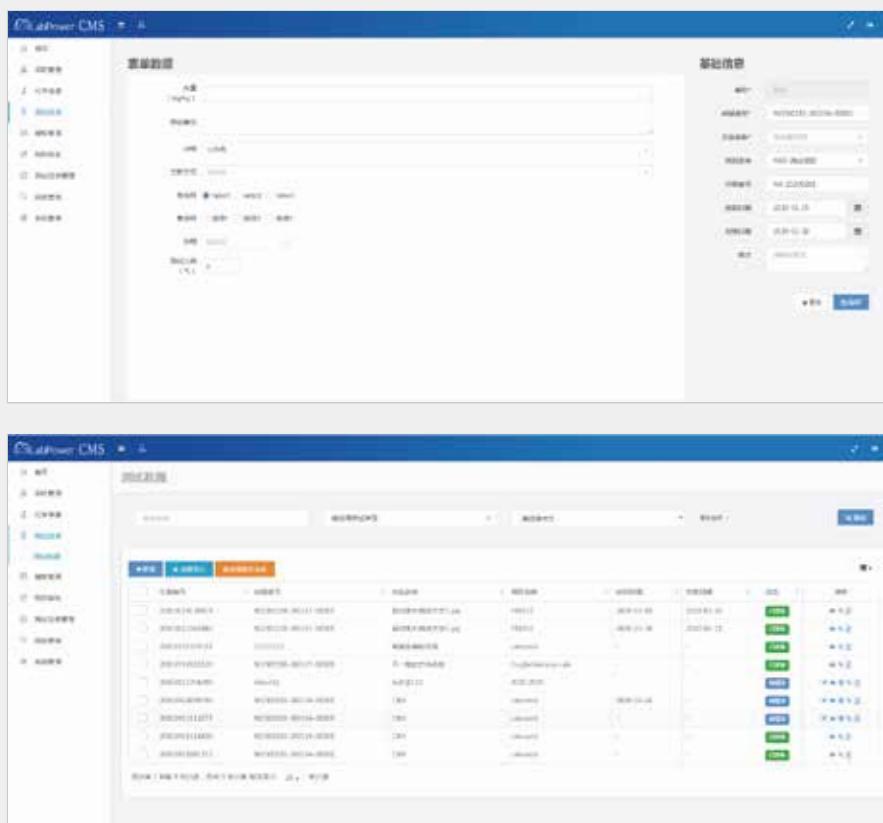




# iLabPower CMS

## ■ 测试信息管理

在测试信息管理模块中，支持对生物测试方法管理，为企业建立规范统一的体外筛选、体外药代和体内药代测试方法。系统提供了多种最佳实践的测试方法标准模板，也可根据企业的试验标准进行自定义配置和修改。同时，在生物信息模块中可实现对生测填写的测试结果进行修改，审批和作废等相应管理。保证对生测数据进行统一规范的信息化管理。



The top screenshot displays the 'Test Method Management' screen. It includes a left sidebar with navigation links like 'Home', 'Test Method', 'Test Plan', 'Test Record', 'Report', 'Setting', and 'Help'. The main area has two tabs: 'Basic Information' (selected) and 'Advanced Settings'. Under 'Basic Information', there are fields for 'Method Name' (e.g., 'LD50'), 'Description' (e.g., 'Acute toxicity test'), 'Parameter Type' (e.g., 'Dose'), 'Parameter Value' (e.g., '1000 mg/kg'), and 'Parameter Unit' (e.g., 'mg/kg'). The bottom screenshot shows a 'Test Result Management' grid with columns for 'Test ID', 'Test Date', 'Test Type', 'Test Result', 'Status', and 'Actions'. There are several rows of data, each with a green 'Edit' button and a red 'Delete' button.

# iLabPower CMS

## ■综合查询管理

综合查询功能支持多种检索方式,如可采用具体的化学指标和(或)生测指标进行精确查询,帮助科学家或领导快速筛选出所需的样品

The screenshot displays the iLabPower CMS web application. At the top, there is a navigation bar with links for '首页' (Home), '综合查询' (Comprehensive Query), '综合报告' (Comprehensive Report), '任务管理' (Task Management), '项目管理' (Project Management), '样品管理' (Sample Management), and '系统设置' (System Settings). A search bar is located at the top right.

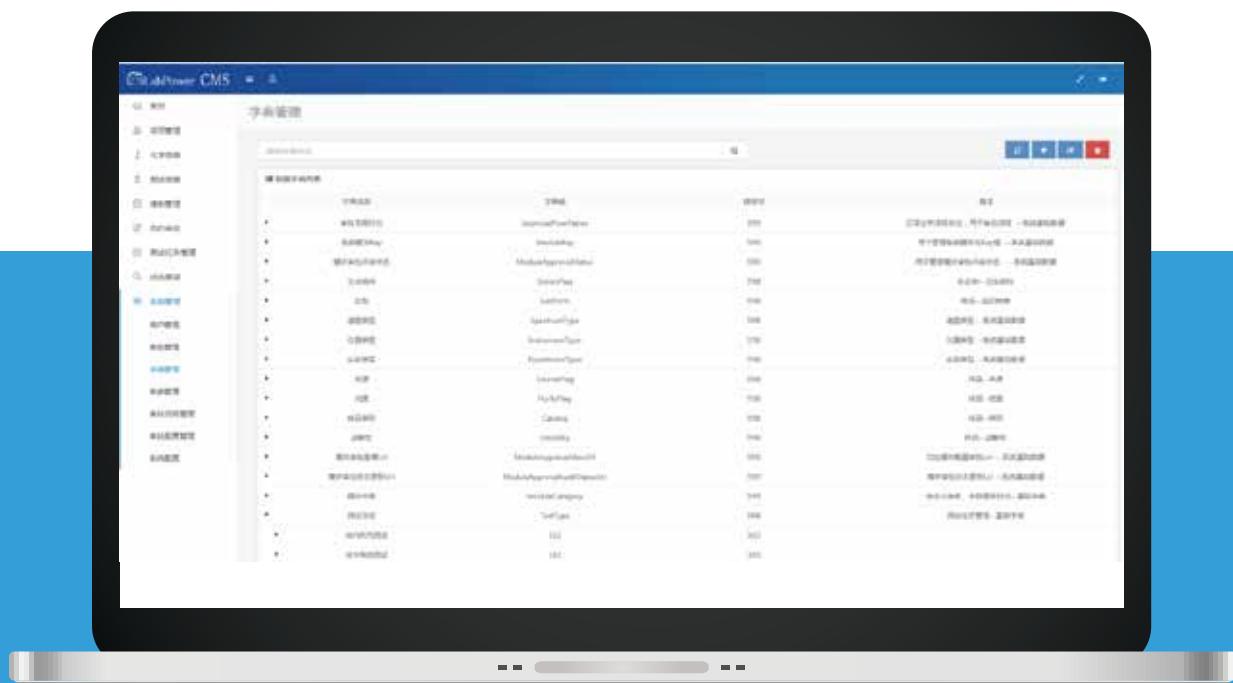
The main content area shows a search results table titled '综合查询' (Comprehensive Query). The table has columns for '化合物编号' (Compound ID), '化合物结构' (Compound Structure), '样品ID号' (Sample ID), '进样编号' (Injection Number), '进样体积' (Injection Volume), '化合物分子量' (Compound Molecular Weight), and several analytical parameters: 'Cellular 21μM', 'Cellular 21(L/Fc/Log)', 'Solubilityg (PmT/K) (d)', 'Cellular 10nm/L/nd', and 'Frappg (A)'. Two rows of data are shown:

化合物编号	化合物结构	样品ID号	进样编号	进样体积	化合物分子量	Cellular 21μM	Cellular 21(L/Fc/Log)	Solubilityg (PmT/K) (d)	Cellular 10nm/L/nd	Frappg (A)
NE001542	<chem>C[C@H]1CC[C@@H](C[C@H]1O)[C@H](O)C[C@H]2[C@H]1[C@H]([C@H]2O)C[C@H]1O</chem>	NE001542-Fab-01	NE03990304	小分子抑 制物活性 检测	451.061	1.00	15.01	21.03	1.23E-08	
NE001652	<chem>O=C1C=CC=C1</chem>	NE001652-HG-00001	NE03990303	ET test: 0.002	133.101.2	0.2115	0.04	21.00±2.30	1.13±0.23	

Below the table, there are two overlapping pop-up windows. The left window is titled '综合查询' and shows a search result for 'NE001542-Fab-01'. The right window is titled '综合字典' (Comprehensive Dictionary) and shows a search result for 'GlegF'.

## ■ 系统管理功能

为满足不同企业对化合物管理的需求,系统提供了很大的灵活性。审批流程配置和管理功能, 满足不同企业的审批需求。用户管理和角色管理,使权限控制更方便,保证数据访问的安全性。字典管理和菜单管理,可让客户自定义显示的菜单,提升用户体现。



## ► 研发智能创新整体解决方案

创腾科技推出研发智能创新整体解决方案的愿景是帮助企业和研发机构从“研发的数字化转型向智能创新迈进，进而变革研发创新的传统模式”，整体方案的三大平台包括从研发的数字化转型(iLabPower平台)，到研发信息孤岛的整合(科学数据基因组平台SDH)，最终能够实现基于科学人工智能技术的研发创新(MaXFlow智能创新平台)。



# iLabPower CMS

## ► 为什么选择创腾

拥有国内1000+企业及学术用户覆盖领域最为广泛



## 他们选择信赖创腾



## 关于创腾科技

创腾科技专注医药和材料科学研发领域20年，通过对云计算，移动互联和科学人工智能的技术的创新应用，帮助企业和创新科研机构快速进行研发的数字化转型，实现智能创新。

创腾科技拥有业界领先的从数字化研发到智能创新的整体移动互联解决方案，包括iLabPower数字化研发平台（涵盖研发与质量检测），SDH科学数据基因组平台和MaXFlow分子模拟与人工智能平台。

创腾科技拥有超过千家用户，正在服务数万名中国的科技精英，国内顶级的科研机构，名列前茅的制药企业，CRO/CDMO和石油化工企业，以及新药创新的明星企业都在利用创腾科技的数字化研发及智能创新平台，实现其智能创新的核心战略。

### iLabPower研发创新数字化平台

iLabPower是通过对移动互联和云计算等新技术的创新应用，借助于创腾对医药和材料研发领域20年的深耕体验，自主研发的新一代基于云端先进架构的数字化研发平台，覆盖从研究发现，产品化开发到生产质量检验整个研发生命周期，涵盖研发项目管理（PM），过程和实验数据管理（EDM/ELN），研发资源（试剂，仪器和设备CIMS）管理以及研发成果（CMS）和申报注册管理（eCTD）。iLabPower可以帮助企业和研究机构快速实现其研发的数字化转型，满足其变革传统研发和创新模式的战略需求。

<https://www.ilabpower.com>了解更多信息

扫描二维码，即刻体验：



创腾科技 | 北京·上海·苏州·广州·成都



北京市海淀区知春路17-7号北航致真大厦A座12层1201室  
电话：010-82676188

江苏省苏州市工业园区东长路88号2.5产业园A2栋301室  
电话：0512-67509707

创腾官网：[www.neotrident.com](http://www.neotrident.com)  
创腾邮箱：[market@neotrident.com](mailto:market@neotrident.com)

上海市浦东新区张江达尔文路88号半岛科技园2栋3层301室  
电话：021-51821768

广东省广州市天河区黄埔大道西33号三新大厦16-E房  
电话：020-88527961

成都市锦江区东御街19号茂业天地A栋33楼3308号  
电话：028-66319683