

药物研究

计算机虚拟筛选技术对黄连解毒汤药效物质功能分群的研究

龙伟, 刘培勋, 高静

(中国医学科学院放射医学研究所, 天津300192)

收稿日期 2007-3-27 修回日期 网络版发布日期 2008-1-17 接受日期

摘要 目的 探讨中医传统理论的分子微观意义. 方法 以中医制方理论“君臣佐使”为参照, 对黄连解毒汤药效分子进行功能分群, 引入计算机虚拟筛选技术. 结果经过实验建立的复方分子功能分群标准, 发现黄连解毒汤265个化学成分分子中“君药”分子12个, “臣药”分子152个, “佐药”分子48个, “使药”分子53个. 结论中药复方药效分子之间存在“君臣佐使”的功能分群, 中药复方“君臣佐使”的制方理论具有分子微观意义.

关键词 [黄连解毒汤](#) [君臣佐使](#) [功能分群](#) [虚拟筛选](#)

分类号 [R286](#) [R284.1](#)

DOI:

对应的英文版文章: [1004-0781 \(2008\) 01-0023-03](#)

通讯作者:

作者个人主页: 龙伟; 刘培勋; 高静

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF](#) (OKB)

▶ [\[HTML全文\]](#) (OKB)

▶ [参考文献\[PDF\]](#)

▶ [参考文献](#)

服务与反馈

▶ [把本文推荐给朋友](#)

▶ [加入我的书架](#)

▶ [加入引用管理器](#)

▶ [引用本文](#)

▶ [Email Alert](#)

▶ [文章反馈](#)

▶ [浏览反馈信息](#)

相关信息

▶ [本刊中 包含“黄连解毒汤”的 相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

- [龙伟](#)
- [刘培勋](#)
- [高静](#)