

中药补气与活血分子作用机理的计算机模拟

吴钉红 徐筱杰

广州中医药大学第二临床医院, 广州 510006; 北京大学化学与分子工程学院, 北京 100871

摘要:

采用分子相似性分析、分子对接和生物网络技术计算机模拟方法对治疗冠心病的中药活血与补气的分子作用机理进行研究. 结果表明, 计算机模拟方法可以体现化合物的结构差异, 并提示中药中化学成分与相关靶标相互作用的分子机理, 而生物网络的构建和分析可以将化学成分的聚类、差异, 以及有效成分与相关靶标的复杂分子作用机理可视化.

关键词: 中药; 补气 活血 分子机理 计算机模拟

收稿日期 2008-09-24 修回日期 2008-12-05 网络版发布日期 2009-01-07

通讯作者: 徐筱杰 Email: xiaojxu@pku.edu.cn

本刊中的类似文章

扩展功能

本文信息

PDF(1304KB)

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

本文关键词相关文章

▶ 中药; 补气

▶ 活血

▶ 分子机理

▶ 计算机模拟

本文作者相关文章

▶ 吴钉红

▶ 徐筱杰