

生物物理化学

精制透骨消痛颗粒防治骨性关节炎的计算机药理学

郑春松, 徐筱杰, 刘献祥, 叶蕪芝

福建中医学院中西医结合研究院, 福州 350108; 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、化学空间、分子对接、生物网络技术和药代动力学性质预测等计算机药理学方法研究中药精制透骨消痛颗粒中514个化合物的药理学机制. 结果表明: 该复方所含化合物在化学结构上具有多样性及大部分化合物在化学空间上具有类药性质; 通过514与35个骨性关节炎疾病相关的公认靶标的相互作用及它们在靶空间的分布上阐明了精制透骨消痛颗粒防治骨性关节炎的可能作用机理, 发现了一些潜在的活性分子; 通过分析药物库中骨性关节炎的药物-靶点的作用网络及精制透骨消痛颗粒中分子-靶点的作用网络的异质性值、特征路径长度等特征, 揭示精制透骨消痛颗粒的多药物、多靶点、多途径分子作用机制. 结果有助于理解中药精制透骨消痛颗粒的复杂作用机制.

关键词: 分子对接 化学空间 靶空间 骨性关节炎 计算药理学

收稿日期 2009-11-02 修回日期 2009-12-25 网络版发布日期 2010-01-26

通讯作者: 徐筱杰, 刘献祥 Email: xiaojxu@pku.edu.cn; liuxianxiang@163.com

本刊中的类似文章

1. 刘振明; 李博; 来鲁华. 磷脂酶A<sub>2</sub>家族的功能性分类研究[J]. 物理化学学报, 2005, 21(10): 1143-1145
2. 刘海春; 邹建卫; 张兵; 庄树林; 蒋勇军; 俞庆森. 对羟基杏仁酸合成酶三维结构建模及其与底物的分子对接研究[J]. 物理化学学报, 2005, 21(08): 852-856
3. 赵勇山 郑清川 张红星 楚慧郢 孙家钟. 人类丝氨酸消旋酶的同源建模及其与多肽类抑制剂的分子对接[J]. 物理化学学报, 2009, 25(03): 417-422
4. 李旭东; 侯廷军; 徐筱杰. 14种结合自由能评价函数的比较[J]. 物理化学学报, 2005, 21(05): 504-507
5. 刘冰; 陆爱军; 廖晨钟; 刘海波; 周家驹. 磺胺基羟肟酸类HDAC抑制剂三维定量构效关系[J]. 物理化学学报, 2005, 21(03): 333-337
6. 孙倪悦 陆涛 陈亚东 郝兰虎 许岩 李瑞君. 3D-QSAR和分子对接研究吡啶咪唑啉类细胞周期蛋白激酶抑制剂的选择性[J]. 物理化学学报, 2009, 25(04): 645-654
7. 魏卓 张怀 崔巍 计明娟. 马来酰胺类糖原合成酶激酶-3 $\beta$ 抑制剂的分子对接和三维定量构效关系[J]. 物理化学学报, 2009, 25(05): 890-896
8. 蒋玉仁, 许慧, 陈芳军, 马贯军. 乙酰胆碱酯酶抑制剂Corydaline的分子对接与开环衍生物的虚拟筛选[J]. 物理化学学报, 2009, 25(07): 1379-1384
9. 徐志广; 许旋; 袁传能. 紫杉醚与 $\alpha\beta$ 微管蛋白的分子对接[J]. 物理化学学报, 2008, 24(10): 1839-1844
10. 李旭东; 黄钦; 徐筱杰. 中药方剂血府逐瘀汤中分子在靶标-配体空间的分布[J]. 物理化学学报, 2008, 24(04): 547-551
11. 袁伟; 李贺先; 王颖; 杨海龙; 王国昌. *N*-(1-萘基)琥珀酰亚胺分子间相互作用的计算机模拟[J]. 物理化学学报, 2007, 23(05): 630-634
12. 吕雯, 吕炜, 牛彦, 雷小平. 毒蕈碱型M<sub>1</sub>受体的同源建模和分子对接[J]. 物理化学学报, 2009, 25(07): 1259-1266
13. 刘滔, 孙茂堂, 董晓武, 任欣, 杨欣, 杜立林, 胡永洲. 基于结构的新型CDK7抑制剂的设计、合成及其抗肿瘤活性[J]. 物理化学学报, 2009, 25(10): 2107-2112
14. 李博, 刘明, 胡文祥. 芬太尼类化合物与阿片 $\mu$ 受体相互作用的分子对接与分子动力学模拟[J]. 物理化学学报, 2010, 26(01): 206-214

扩展功能

本文信息

PDF(2733KB)

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

▶ 分子对接  
▶ 化学空间  
▶ 靶空间  
▶ 骨性关节炎  
▶ 计算药理学

本文作者相关文章

▶ 郑春松  
▶ 徐筱杰  
▶ 刘献祥  
▶ 叶蕪芝