

- [3] 中华人民共和国卫生部药品标准维吾尔药分册 [S]. 1999
- [4] 邓淑文, 哈木拉提. 百癣夏塔热体外抗真菌活性研究 [J]. 中药药理与临床, 2006, 22(3, 4): 166-169
- [5] 王端礼, 李若瑜, 王爱平, 等. 医学真菌学 实验室检验指南 [M]. 北京: 人民卫生出版社, 2004
- [6] 古力娜·达吾提, 尤丽吐孜, 艾则孜·亚森, 等. 维药地锦草软膏的体外抗真菌及其对豚鼠皮肤真菌感染的治疗作用研究 [J]. 中药药理与临床, 2007, 23(5): 178-180
- [7] Santos D A, Barros M E, Hamdan J S. Establishing a method of inoculum preparation for susceptibility testing of *Trichophyton rubrum* and *Trichophyton mentagrophytes* [J]. *Clin Microbiol*, 2006, 44(1): 98-101
- [8] Maertens J A. History of the development of azole derivatives [J]. *Clin Microbiol Infect*, 2004, 10(suppl 1): 1-10

复方瑞康欣胶囊对吗啡依赖戒断大鼠焦虑行为及海马突触素表达的影响

何继锋¹, 钱刚¹, 罗素元^{1*}, 吴明松¹, 凌铎², 李晓东³

(1. 遵义医学院 细胞生物学与遗传学教研室, 贵州 遵义 563003; 2. 遵义医学院 中心实验室, 贵州 遵义 563003; 3. 珠海瑞桦戒毒康复中心, 广东 珠海 519047)

摘要:目的 观察复方瑞康欣对吗啡依赖戒断大鼠焦虑行为的影响, 并探讨其作用机制。方法 健康雄性 SD 大鼠, 剂量递增法 sc 吗啡 10 d, 确认吗啡依赖模型建立成功后, 在吗啡自然戒断的 1~3 d, 复方瑞康欣 100、200、300 mg/kg 和丁螺环酮 15 mg/kg ig 治疗 (2 次/d), 于末次吗啡注射后 72 h, 高架十字迷宫实验评价大鼠的焦虑水平, 免疫组化检测各组大鼠海马突触素的表达。结果 与生理盐水 (NS) 治疗组比较, 复方瑞康欣 200、300 mg/kg 和丁螺环酮治疗能明显增加大鼠进入开臂次数和时间的比例 ($P < 0.01, 0.05$), 同时海马突触素的表达显著降低 ($P < 0.01$)。结论 复方瑞康欣对吗啡依赖大鼠戒断后的焦虑治疗效果明显; 逆转焦虑大鼠海马增高的突触素/突触, 可能是复方瑞康欣临床治疗吗啡戒断后焦虑的机制之一。

关键词: 复方瑞康欣; 吗啡戒断; 焦虑; 突触素; 海马

中图分类号: R286.1 文献标识码: A 文章编号: 0253-2670(2009)05-0763-05

Effects of Compound Ruikangxin Capsula on anxiety-like behavior and relative expression of hippocampal synaptophysin in morphine-withdrawal rats

HE Ji-feng¹, QIAN Gang¹, LUO Su-yuan¹, WU Ming-song¹, LING Xin², LI Xiao-dong³

(1. Department of Cell Biology and Genetics, Zunyi Medical College, Zunyi 563003, China; 2. Central Laboratory, Zunyi Medical College, Zunyi 563003, China; 3. Isolation and Healing Institute of Ruihua, Zhuhai 519047, China)

Abstract: Objective To observe effect of Compound Ruikangxin Capsula (CRC) on anxiety-like symptoms of morphine-withdrawal rats and investigate its mechanism. **Methods** The elevating doses were applied to validating anxiety-like behavior in SD male rats with sc morphine for 10 d. Treatments with ig administration of CRC (100, 200, and 300 mg/kg) and buspirone (15 mg/kg) were performed during 1—3 d morphine withdrawal (twice every day). The plus elevated maze was applied to validating anxiety-like symptom in rats. The expression levels of synaptophysin were detected on hippocampus in groups by immunohistochemistry 72 h after sc morphine. **Results** As compared with the control group, animals treated with CRC (200 and 300 mg/kg) and buspirone had higher ratio of entry into open arm ($P < 0.01$), as well as time of remaining in open arm ($P < 0.05$). At that, lower level of synaptophysin was measured on hippocampus from those rats ($P < 0.01$). **Conclusion** CRC would play an important role in rehabilitating the anxiety-like behavior in morphine-withdrawal rats. Reversal of synaptophysin on hippocampus of anxious rats could be contributed to exploring the mechanism.

Key words: Compound Ruikangxin Capsula (CRC); morphine withdrawal; anxiety; synaptophysin; hippocampus

* 收稿日期: 2008-12-03

基金项目: 国家自然科学基金资助项目 (30860373); 教育部科学技术重点项目 (206136);

贵州省教委重点项目 (黔教科 2005109)

作者简介: 何继锋 (1974—), 男, 河南省商丘市人, 在读硕士研究生, 执业药师, 主要从事阿片类药物依赖研究工作。

Tel: 15085114306 E-mail: hjf1125@126.com

* 通讯作者 罗素元 Tel: 13984276456 E-mail: swx_100@163.com

复方瑞康欣胶囊 (Compound Ruikangxin Capsula, CRC) 是由元胡、川芎、当归、钩藤等组成的中药复方制剂。前期临床研究表明, 该药对阿片类药物成瘾者的戒断症状尤其是稽延性戒断症状治疗效果肯定^[1]。动物实验研究表明复方瑞康欣对吗啡依赖大鼠戒断症状有明显抑制作用^[2], 由于稽延性戒断症状(主要包括焦虑、疼痛、失眠等)是导致成瘾者复吸的主要原因之一, 也是西药戒毒至今难以解决的问题。因此, 阐明其药理学机制就显得非常必要。但至今, 尚未见到这方面的报道, 更未见到该药就稽延性戒断的某具体症状进行有针对性的研究。与此同时, 本课题组在动物实验中发现, 在吗啡依赖戒断大鼠焦虑(既系稽延性戒断症状的主要表现之一, 又与患者的觅药行为呈正相关)发生时, 其海马 CA1 和 CA3 区发生有神经细胞突触结构的可塑性^[3]。由于突触素是一种存在于突触囊泡膜的整合蛋白, 可以作为突触的特异性标记物用以检测突触的密度和分布^[4]。为此, 本研究应用高架十字迷宫实验, 通过观察复方瑞康欣胶囊对吗啡依赖戒断大鼠焦虑行为的影响, 评价复方瑞康欣胶囊对戒断后焦虑的治疗效果; 并通过对海马突触素表达的检测, 探讨其作用机制, 为临床应用于吗啡稽延性戒断症状的治疗提供科学的依据。

1 材料

1.1 实验动物: 健康雄性 SD 大鼠, 2 月龄左右, 体重 150~180 g, 第三军医大学实验动物中心提供, 合格证号: SCXX-(军) 2007017, 实验前适应性饲养 1 周。

1.2 药品与试剂: 盐酸吗啡注射液, 沈阳第一制药厂; 丁螺环酮片, 江苏恩华制药厂(实验时配成 1.2 mg/mL 的溶液); 盐酸纳洛酮注射液, 徐州恩华药业; 复方瑞康欣, 广东省珠海瑞桦戒毒康复中心, 棕色颗粒(该颗粒制药原料和提取颗粒均有中药薄层色谱图作为质量控制的技术标准^[1]), 实验时分别配成 8、16、24 mg/mL 的溶液。突触素 (P38) 免疫组化试剂盒, 美国 Sigma 公司。

1.3 仪器: 高架十字迷宫, 成都泰盟科技公司研制, 附红外自动跟踪分析系统。由两个相对的敞开臂(长×宽均为 50 cm×10 cm)、两个相对的封闭臂(长×宽×高均为 50 cm×10 cm×40 cm)组成, 迷宫中央为 10 cm×10 cm 的平台, 迷宫离地面 50 cm, 封闭臂上部未封顶, 敞开臂边缘由 1 cm 的矮挡板围成, 以防动物滑下迷宫。实验时红外装置自动跟踪, 电脑相关软件自动记录数据。Leica Qwin 细

胞图像分析系统, 德国。

2 方法

2.1 动物分组: 96 只大鼠随机分为生理盐水 (NS) 对照组, 吗啡焦虑模型组, NS 治疗组, 丁螺环酮组, 复方瑞康欣高、中、低剂量 (300、200、100 mg/kg) 组共 7 组, 除 NS 对照组和模型组大鼠为 18 只外, 其余每组均为 12 只。

2.2 建立吗啡依赖模型: 除对照组外, 其余各组大鼠均行颈背部 sc 吗啡, 2 次/d (上午 8:00、下午 18:00), 连续用药 10 d, 首次剂量为 5 mg/kg, 1~5 d 每日以 5 mg/kg 递增、6~8 d 每日以 10 mg/kg 递增、9~10 d 以 15 mg/kg 递增; 对照组大鼠除给予等量 NS 替代吗啡外, 其余处理皆相同。在末次 sc 吗啡后 2 h, 从对照组和模型组大鼠中各随机抽取 6 只, 分别 ip 纳络酮 (5 mg/kg) 催瘾, 按文献方法^[5]观察戒断症状、记录及评分, 在确认吗啡依赖模型建立成功后, 进行后续实验。

2.3 药物治疗: 确认大鼠吗啡依赖模型建立成功后, 实验 11~13 d 行吗啡自然戒断, 同时复方瑞康欣各组大鼠分别 ig 药物 300、200、100 mg/kg, 丁螺环酮组 ig 15 mg/kg 药物, NS 治疗组则 ig 等体积 NS, 2 次/d。

2.4 高架十字迷宫检测大鼠焦虑行为: 在第 13 天(即末次吗啡注射后 72 h), 各组大鼠行高架十字迷宫实验。方法及评价标准为: 迷宫测试前将每只大鼠放入空旷处, 任其自由活动 5 min 后, 迅速置于高架十字迷宫的中央平台处, 使其头部正对其中一个开放臂, 释放后计算机将在 5 min 内开始记录下述数据: ①进入开臂的次数, ②在开臂的停留时间, ③进入闭臂的次数, ④在闭臂的停留时间。每只大鼠迷宫时间为 5 min, 由以上①~④项分别计算出: 进入开臂和闭臂的总次数, 在开臂和闭臂停留的总时间, 进入开臂次数比例[即开臂次数/开臂和闭臂总次数×100%], 开臂停留时间比例(即开臂停留时间/开臂和闭臂停留总时间×100%)。

2.5 海马突触素表达的检测: 经高架十字迷宫测试后, 每组取 6 只大鼠 3% 戊巴比妥 ip 麻醉(余 6 只做其他实验), 用 4% 多聚甲醛经心脏灌注固定, 开颅取脑, 后固定、常规脱水、包埋并连续冠状切片, 片厚 5 μm。然后选取海马组织结构完整的切片, 每隔 20 μm 取一片, 每鼠取 6 张, 按突触素检测试剂盒说明操作, 采用亲和素-生物素复合物法进行染色。实验同时设阴性对照, 除磷酸缓冲液替代一抗外, 其他染色步骤相同。Leica Qwin 细胞图像分析

系统观察海马突触素免疫反应产物,并在每张切片的 CA3 区相同光学条件下随机各取 3 个视野拍照 (400 倍), Image-Pro Plus 软件计算每张照片的平均吸光度值。

2.6 数据统计: 所得数据均用 SPSS 10.0 软件统计处理, 多组资料的比较采用单因素方差分析 (ONE-WAY ANOVA) 进行检验, 两组资料的比较, 采用两两比较的 t 检验, 所用数据用 $\bar{x} \pm s$ 表示。

3 结果

3.1 高架十字迷宫实验结果: 由表 1 可见, 与 NS 对照组比较, 吗啡焦虑模型组的开臂次数比例及开臂停留时间比例显著降低 ($P < 0.01, 0.05$), 表明应用吗啡的大鼠在戒断后 72 h 呈现出了明显的焦虑反应。与 NS 治疗组比较, 复方瑞康欣高、中剂量组的开臂次数比例、开臂停留时间比例均增高 ($P < 0.01, 0.05$), 低剂量组虽然也增高, 但无统计学差异 ($P > 0.05$); 而丁螺环酮组两项指标也增高 ($P <$

$0.01, 0.05$); 且复方瑞康欣高、中剂量组的开臂次数比例和开臂停留时间比例与丁螺环酮组接近。以上各组进入开臂和闭臂的总次数及总停留时间无显著性差异 ($P > 0.05$), 表明复方瑞康欣高、中剂量和丁螺环酮均能显著增加大鼠的进入开臂次数比例及开臂停留时间比例, 但对总的运动能力无影响。

3.2 突触素表达: 定量结果显示, 模型组突触素平均吸光度值 ($0.43 \pm 0.05, n = 108$) 较 NS 对照组 ($0.25 \pm 0.03, n = 108$) 显著增高 ($P < 0.01$), 这说明吗啡戒断焦虑的大鼠, 其海马突触素表达增加。与 NS 治疗组 ($0.41 \pm 0.06, n = 108$) 比较, 丁螺环酮及复方瑞康欣高、中剂量组突触素平均吸光度值 ($0.26 \pm 0.03, 0.28 \pm 0.03, 0.29 \pm 0.04, n = 108$) 明显降低 ($P < 0.01$), 虽然复方瑞康欣低剂量组 ($0.39 \pm 0.06, n = 108$) 也降低, 但无统计学差异 ($P > 0.05$); 并且, 丁螺环酮及复方瑞康欣高、中剂量 3 组的数值接近。结果见图 1。

表 1 各组大鼠高架十字迷宫实验结果 ($\bar{x} \pm s, n = 12$)

Table 1 Result of elevated plus maze test in rats among groups ($\bar{x} \pm s, n = 12$)

组别	剂量/(mg · kg ⁻¹)	进入开臂和闭臂总次数	开臂和闭臂总停留时间/s	开臂次数比例/%	开臂停留时间比例/%
NS 对照	-	16.33 ± 3.23	233.50 ± 34.49	0.47 ± 0.08 ^{△△}	0.48 ± 0.10 [△]
模型	-	16.83 ± 3.09	237.83 ± 31.08	0.25 ± 0.08 ^{**}	0.34 ± 0.09 [*]
NS 治疗	-	16.25 ± 3.49	244.00 ± 33.14	0.27 ± 0.11 ^{**}	0.32 ± 0.08 [*]
丁螺环酮	15	15.58 ± 4.36	250.75 ± 41.96	0.46 ± 0.08 ^{△△}	0.45 ± 0.13 [△]
复方瑞康欣	300	15.42 ± 3.80	251.92 ± 29.15	0.47 ± 0.15 ^{△△}	0.46 ± 0.05 [△]
	200	16.42 ± 3.40	246.25 ± 41.82	0.44 ± 0.09 ^{△△}	0.43 ± 0.10 [△]
	100	16.33 ± 3.33	242.92 ± 32.54	0.30 ± 0.16 [*]	0.35 ± 0.07 [*]

与 NS 对照组比较: * $P < 0.05$ ** $P < 0.01$; 与 NS 治疗组比较: [△] $P < 0.05$ ^{△△} $P < 0.01$;

^{*} $P < 0.05$ ^{**} $P < 0.01$ vs NS control group; [△] $P < 0.05$ ^{△△} $P < 0.01$ vs NS treatment group

4 讨论

高架十字迷宫实验为抗焦虑研究中的非条件反射模型, 该模型中的开臂为风险区, 对动物既具一定的新奇性又具有一定的威胁性, 而闭臂为安全区。实验利用动物对新异环境的探究特性和对高悬敞开臂的恐惧心理, 形成矛盾冲突状态来考察其焦虑反应。测试时记录一定时间内大鼠进入开臂的百分比和在开臂停留时间的百分比, 如果动物的焦虑反应明显, 两数值均降低。抗焦虑剂能增加大鼠的这两个值, 致焦虑剂则使之减少, 但均不改变入臂的总次数和总时间 (二者代表动物的兴奋或抑制状态)。该方法以动物的自发行为为基础, 无需特殊训练, 在精神药理学中被广泛用于抗焦虑药物治疗效果的评价。

在本实验, 模型组大鼠经高架十字迷宫测试, 显示其进入开臂次数比例和停留时间比例均降低, 说明在吗啡自然戒断 72 h 左右, 大鼠出现了明显的焦虑, 这与应用 Vogle 饮水冲突实验 (条件反射性模

型) 得出的结果一致^[6]。通过复方瑞康欣和丁螺环酮治疗后, 在焦虑大鼠入臂的总次数和总时间未改变的前提下, 复方瑞康欣中、高剂量和丁螺环酮 3 组的进入开臂次数比例和停留时间比例值均显著增高, 但 3 组本身的进入开臂次数比例和停留时间比例却比较接近, 这说明复方瑞康欣具有明显减轻吗啡戒断所引起焦虑的作用, 其作用强度与经典抗焦虑剂丁螺环酮相似。

本课题组前期曾用电镜体视学方法观测吗啡依赖戒断焦虑大鼠海马 CA1 和 CA3 区, 发现有神经细胞突触结构的可塑性变化, 包括突触的数密度、面密度增加, 突触后致密物质增厚等; 同时还证明该变化可被经典抗焦虑药物——丁螺环酮所逆转。因此, 认为该变化可能是引起吗啡依赖戒断后焦虑产生的机制之一^[3]。突触素是一种相对分子质量为 3.8×10^4 的钙结合蛋白, 在神经元胞体合成后主要转运至轴突终末, 特异性存在于突触前囊泡膜上, 一

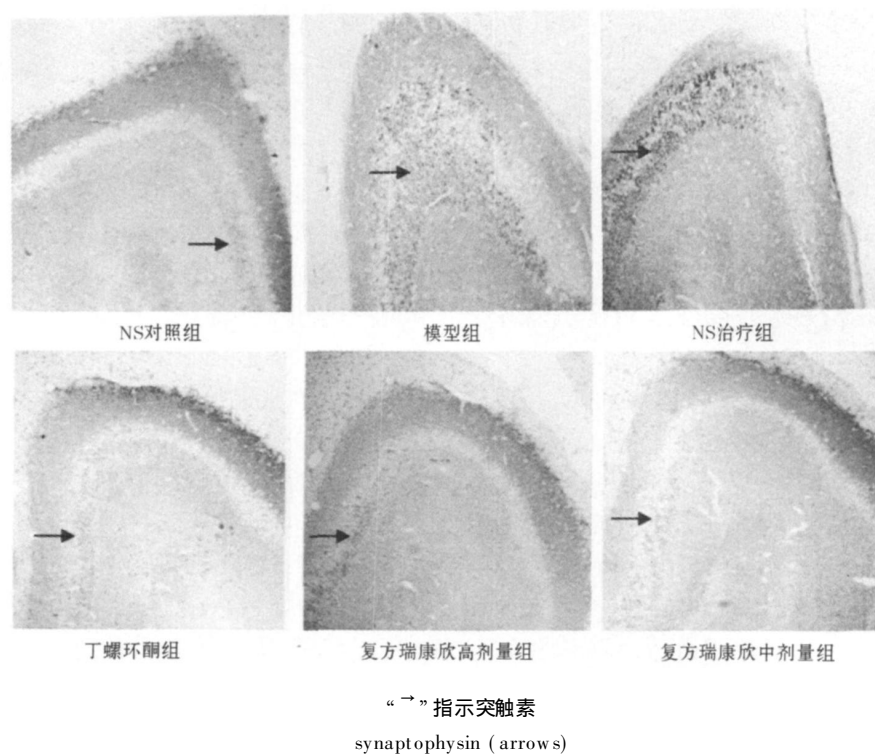


图 1 各组大鼠海马 CA3 区突触素 P38 免疫组化结果

Fig. 1 Immunohistochemical result of synaptophysin P38 on hippocampal CA3 field of rats among groups

般认为其功能主要是构成突触囊泡膜特异性的膜通道、膜囊泡的融合、钙离子依赖性神经递质的释放和突触的发生等。颗粒样突触素免疫反应产物的定位和定量测定,反映了被检测区域突触的分布和密度,借助图像分析系统测定其平均吸光度值,即可在光镜水平对突触素的量进行定量分析,从而了解突触数量的变化。本实验发现,模型组大鼠海马突触素免疫反应产物平均吸光度值较 NS 对照组明显增高,说明在吗啡戒断焦虑发生时同时有突触密度的增加,这与电镜结果吻合。经用复方瑞康欣和丁螺环酮治疗后,虽然复方瑞康欣低剂量组平均吸光度值改变不明显,但中、高剂量和丁螺环酮 3 组均下降,且 3 组该值都与 NS 对照组接近。最值得注意的是,突触素平均吸光度值的下降与抑制大鼠的焦虑行为一致,这提示,同丁螺环酮类似,通过逆转吗啡戒断焦虑发生时增加的突触素/突触,可能是复方瑞康欣临床治疗吗啡戒断焦虑/稽延性戒断症状的机制之一。

既往的研究已发现,吗啡戒断可使神经细胞 $[Ca^{2+}]_i$ 急剧升高^[7],从而使神经递质大量释放,其中大量释放的谷氨酸可引起 N-甲基-D-天冬氨酸受体 (NMDAR) 活性的改变,继而可通过 NMDAR 介导的突触结构和功能的可塑性机制来影响动物的行为^[8]。因此,推测复方瑞康欣逆转吗啡戒断焦虑

大鼠海马的突触素/突触,可能是因为海马等边缘系统富含 NMDAR,而复方瑞康欣制剂主要有效成分川芎嗪可促进细胞内 Ca^{2+} 外流^[9];延胡索乙素不但具有镇痛、镇静等作用,还可阻止细胞 Ca^{2+} 内流^[10],拮抗海马神经细胞 $[Ca^{2+}]_i$ 的升高,使谷氨酸释放减少,从而阻碍了 NMDAR 因为活性变化而介导的突触结构和/或功能可塑性的发生而使焦虑症状得以控制。

综上所述,复方瑞康欣对吗啡依赖大鼠戒断后的焦虑治疗效果明显;逆转焦虑大鼠海马增高的突触素/突触,可能是复方瑞康欣临床治疗吗啡戒断后焦虑/稽延性戒断症状的机制之一。本实验从行为和神经细胞突触的角度为复方瑞康欣临床治疗吗啡稽延性戒断症状提供了科学理论依据,但药物的作用机制仍有待深入研究。

参考文献:

- [1] 李晓东,麦创富,邓菊平,等. 中药瑞康欣胶囊的质量和在戒毒中的疗效观察 [J]. 中国药物滥用防治杂志, 2007, 13 (4): 194-195
- [2] 李晓东,邓菊平,文兴,等. 复方瑞康欣对吗啡依赖大鼠戒断症状及下丘脑和丘脑单胺类神经递质的影响 [J]. 中草药, 2008, 39 (2): 255-258
- [3] 高家林,黄彬,罗素元,等. 吗啡依赖戒断焦虑大鼠海马突触结构的可塑性 [J]. 解剖学杂志, 2008, 31 (1): 40-42
- [4] Ekici M, Schmitz F, Hohl M, et al. Chromatin structure and expression of synapsin I and synaptophysin in retinal precursor cells [J]. Neurochem Int, 2008, 53 (5): 165-172
- [5] 纪家涛,王新华,由振东,等. 吗啡依赖大鼠模型的建立

- [J]. 第二军医大学学报, 1997, 18(1): 81-82
- [6] 刘 屏, 陈世铭, 侯津详. 高架十字迷宫和 Vogel 饮水冲突法用于吗啡依赖动物焦虑评价 [J]. 中国药理学通报, 1997, 13(6): 563-565
- [7] Esmaeili-Mahani S, Fathi Y, Motamedi F, *et al.* L-type calcium channel blockade attenuates morphine withdrawal: *in vivo* interaction between L-type calcium channels and corticosterone [J]. *Horm Behav*, 2008, 53(2): 351-357
- [8] 李欢欢, 林文娟. 中枢 N-甲基-D-天冬氨酸受体在应激所致行为改变中的作用 [J]. 心理科学进展, 2005, 13(3): 329-326
- [9] 苏明华, 周亚光, 杨光田. 川芎嗪对原代培养大鼠海马神经元 L 型钙通道电流和胞浆内钙浓度的影响 [J]. 中国康复, 2008, 23(2): 17-19.
- [10] Wang Y Q, Cao X D, Wu G C. Role of dopamine receptors and the change of the tyrosine hydroxylase mRNA in acupuncture analgesia in rats [J]. *Acupunct-Electrother Res*, 1999, 24(2): 81-88.

梔子环烯醚萜类成分活性作用的虚拟评价

符海霞^{1,2}, 刘 鹏², 王玉丽², 邢 洁^{1,2}, 刘冰妮², 徐为人^{2*}, 汤立达³

(1 天津医科大学基础医学院, 天津 300070; 2 天津药物研究院 天津市新药设计与发现重点实验室, 天津 300193; 3 天津药物研究院 天津药代动力学与药效动力学省部共建国家重点实验室, 天津 300193)

摘要:目的 利用理论对接方法对梔子中环烯醚萜类成分的可能活性进行虚拟评价。方法 选取 6 个梔子环烯醚萜类成分, 收集现有常见靶标的晶体结构, 利用 Schrödinger 软件进行计算, 以分级标准评价选择性。结果 环烯醚萜类的选择性靶标涉及癌症、炎症、肺结核、阿尔茨海默病、痴呆、糖尿病、哮喘、慢性阻塞性肺疾病、心衰、高血压、自身免疫疾病、抑郁症、疟疾等疾病。糖基对于环烯醚萜类的作用具有重要影响, 饱和五元环对于提高选择性具有较大意义。结论 虚拟评价发现的环烯醚萜苷的活性作用与报道的实验结果吻合较好, 表明该技术具有较大的实用性, 本研究为利用理论手段研究中药的作用机制进行了有益的尝试。

关键词: 梔子 环烯醚萜类 虚拟评价

中图分类号: R285.5

文献标识码: A

文章编号: 0253-2670(2009)05-0767-05

Virtual evaluation on activities of iridoids from cape jasmine fruit

FU Haixia^{1,2}, LIU Peng², WANG Yuli², XING Jie^{1,2}, LIU Bingni², XU Weiren², TANG Lida³

(1 School of Fundamental Medical Sciences, Tianjin Medical University, Tianjin 300070, China; 2. Tianjin Key Laboratory of Molecular Design and Drug Discovery, Tianjin Institute of Pharmaceutical Research, Tianjin 300193, China; 3. Tianjin State Key Laboratory of Pharmacokinetics and Pharmacodynamics, Tianjin Institute of Pharmaceutical Research, Tianjin 300193, China)

Abstract: Objective To elucidate potential activities of iridoids from cape jasmine fruit by theoretical docking calculation. **Methods** Six iridoids from cape jasmine fruit were selected as ligands. The crystalline structures of targets related to common diseases were used as the receptors for calculation. The calculations were conducted with Schrödinger software package. The grading standard of selectivity was developed according to G-score between ligands and receptors. **Results** Selective targets of iridoids were related to cancer, inflammatory diseases, tuberculosis, Alzheimer's disease, dementia, diabetes mellitus, asthma, chronic obstructive pulmonary disease, heart failure, hypertension, autoimmune diseases, depression, malaria, and so on. The glucosyl group had a significant influence to the activities of iridoids, and saturated five-ring was effective to improve the selectivity. **Conclusion** The effects of iridoids on diseases founded through virtual evaluation accorded greatly with those reported in the experiment and clinic. It means that the virtual evaluation is of value in practice. The study is a meaningful attempt to deal with the comprehensive actions of Chinese materis medica in a theoretical way.

Key words: cape jasmine fruit; iridoids; virtual evaluation

梔子是一味常用中药, 具有泻火除烦、清热利尿、凉血解毒之功效^[1], 内服用于热病心烦、黄疸尿

* 收稿日期: 2008-12-17

基金项目: 科技部支撑项目 (2007BAI41B01); 天津市支撑项目 (07ZCKFSH00300)

作者简介: 符海霞, 女, 辽宁人, 硕士研究生, 研究方向为新药设计和筛选。E-mail: fuxiao0130@163.com

* 通讯作者 徐为人 Tel: (022) 23003529 E-mail: xwrtj@yahoo.com.cn