





References

FÉÁ Óæ∥|Á RÓÉÁ P ||| , æ^Á ÖÇÉ ÇGEFÉDÁ Þ^, Á^~ á^c!^ &c^!^Á , |c^!^Á - [Á^!^ { Çæ|Á [- Á] æ} Á æ^æ^Á}c^!^!^&^!^& [{] []^ } á^ÇUCEPÚDÁ-! [{ Á^&!^!^} }^ Á|jæ!æ!æ!æ^æ}á^-[Ác@^Á!Á^ Á^&|^}i []^}Áá [æ^æ^æ^ÉRÁ T^Áá!Ö@^ { ÁGTFJÉGÍ I ÉÉ

2. Óæ[!æc@Á RÉÁ Ú^|çæ^] Á ŠÉÁ Yæ, Á^Á TÁ ÇGEEJDÁ Þæçá^æç}^* Á^c!^ &c^!^ÁÉæ&çáç^Á landscapesÉÁÓ!^ *ÁÖi^& [ç^V [áæ^ÁFIÁÇFH. FIDKÁJÍÉIÉÉ

3. Ó^!^ T^ÉÉØæ∥|Á} *ÁÖÖÉÁÖæ { æ∥|Á}ÁRÁÇGEFÍDÁÚ [c^] çæ|!^Á [æÁÚ]^&c!^ { }^} @iæc [!^ Á [-Ác@^Á& []^} æç!^ *ÁHÓŠ [!^æç!^c^ æ|Á^&!^!^} }^ }^} á^c!^ &c^!^ÁÉææ^Áá!^!^ *Áá^æ!^} . c^~ á^Xá!^ *Á^ÁÇFGDKÁÍ I GÉÍ I ÉÉ

ÍÉÁ Óæ []^ : á!ÚRÉÁ T^!æc [ç^ÓPÉÁV []^} @æÚ@æ]c [{ ÇÉÇGEFÍDÁProblems with the Utility of ÇE^!^c@Á- [ÁÚæ}ÉÇE^æ^ÁÚPc^!^!^!^&^!^Ó [{] []^ }^} áÉÁRÁÖ@^ { ÁQ}-Á T [á^]ÁÍ ÁÇHDKÁ I FÍÉ I GÍÉ

ÍÉÁ Ö [!c^*ææ} áÇÉÉÁQ} * []^}ææ!ÖÉÁQ [] []^} [Á T^ÉÁ Öiæ!^æææ} [ÁÇÉÁÇGEÉDÁÇÉÁ^*c^ { æç!^Á!^ç!^, Á []^}Ác@^Á^ &æ&^æ}á^æ^æ^Á [-Á&@ [] []^ }^} Á^-[Ác@^Áç!^æc { ^} ç^[-ÁÓUXÓÉFJ. J Crit Óæ!^ÁÍ ÁÇHDKÁ I FÍÉ I GÍÉ

6. Ö []^ *ÁÖÉÖ^ÁÖŠÉÁÖæ!^} Á^ÁŠÁÇGEÉDÁÇÉÁ}^}c^!^æ&çáç^Á, ^áÉææ^Áááæ^@Á [æ!^Ác [Ác@Á^Á ÖUXÓÉFJÁ}Á^æ|!^çá { ÁŠæ} &^&ÁQ}-^&c!^ÁÁÇFGDKÁÍ I GÉÍ I ÉÉ

ÍÉÁ Øæ}PÉÁYæ} *ÁŠÚÇGEÉDÁÚ^} [] []^} *Á[-Á}Á}á}ææ|!^æ} []^}ç^!^Á!^ *Á^ [!c^!^æc { ^} ç^ [-Á& [] []^} æç!^ *Áá^Áæ^ÁÇGEFJÁ}ææ!ÇGEFJÉ [ç^]Á& [] []^} æç!^ * . Model Chin Med J.

ÍÉÁ Öæ [ÁRÉÁVææ} ÁZÉÁYæ} ÁYÁÇGEÉDÁÖ^Áæ@!^} *Á@Ö@ [] []^ }^} Á^ []^} @æ^Á@æ^Á@ []^ }^} Áæ}]æ!^} ç^!^ } æ&^Á} Ác!^æc { ^} ç^ [-ÁÓUXÓÉFJÁææ^ *Áæ&^Áá}]^ } []^}ææ!^} Á&|Á}á&æ|Á c^~ á!^ÉÁÖ@ []^}á^V!^} á^ÁFIÁÇFGDKÁÍ GÉÍÉ

9. Ø|Áç^}Á^ÁÖÇFJJÍDÁPOXÉ []^}c^æ^Á} @iæc [!^ Á^!^Ö} *ÁRÁ T^Áá!HHÍ KÁFG I FÉFGJÉ

FÉÁÖ@ []^}ÁÇESÉÁ Ú^ , æ|áPŠÁÇGEFÍDÁÚ!æc [ÁÚ^&^} ç^] []^} *Á^Áæ^Á}Ác@^Á^Áç^! []^} ^} ç^ [-Á POXÉFÁ] []^}c^æ^Á} @iæc [!^ Á^}Ác@^Áç!^æc { ^} ç^ [-ÁPOXÇÉÖÚÉÁRÁ T^Áá!Ö@^ { ÁÍÁÇFGDKÁ Í FÍGÉ I GÉ I ÉÉ

FFÉÁŠç! ZÉÁ Ö@^ ÁYÉYæ} *ÁÁYÇGEFÍDÁPOXÁ []^}c^æ^Á} @iæc [!^ Áæ!^Áç!^, Á [-Á []^}æ!^Á selectivity and toxicityÉÁPOXÁÇÉÖÚÉÁÚ^ÁÚæ||æc!Öæ!^ÁKJ I ÉFÉ I ÉÉ

FGÉAY []^}áæ , Á^ÁÇÉX []^}áæ^Á^ÁRÁÇFJFI DÁQ @iæc [!^ Á^!^POXÉFÁ] []^}c^æ^Á}Áæ { æ []^}Á^ &^Á^Á [-Ác!^ &c^!^ÁÉæ^æ^æ^Áá!^!^ *Áá^æ!^} ÉÁÇE} }^} ÁÚ^ç!^Óá []^} @^ÁÖá []^}ÁÚc!^ &c!^GTFKÁG I JÉ GÍÉ

FHEÁ Óæ∥|Á RÓÉÁ P ||| , æ^Á ÖÁ ÇGEFÉDÁ Þ^, Á^~ á^c!^ &c^!^Á , |c^!^Á - [Á^!^ { Çæ|Á [- Á] æ} Á æ^æ^Á}c^!^!^&^!^& [{] []^ } á^ÇUCEPÚDÁ-! [{ Á^&!^!^} }^ Á|jæ!æ!æ!æ^æ}á^-[Ác@^Á!Á^ Á^&|^}i []^}Áá [æ^æ^æ^ÉRÁ T^Áá!Ö@^ { ÁGTFJÉGÍ I ÉÉ

FÍÉÁÚæc^!^ []^} ÁÖŠÉÁ Ú^ , æ∥|Á ÚÉÁ T []^}ÁRÉÁÖ!^c^!^Á TÁÇGEEÉDÁÇÉÁ@^!^&^!^Ó []^} []^}c^æ^Á^ Á} @iæc [Ác@^Á}^} Áæ} á^ [-Á^}Á}Á}æç!^}c^!^, ác@^ÁPOXÁ}^&c!^}ÉÁÇE} }^}ÁQ}c^!^} Á T^Áá FHHÁÇFGDKÁFÉHÉÉ

FÍÉÁÚi&^ÁÖYÉÁÖ []^}á^ÚÚÉÁ Tæ; ÁÇÉÁÇGEFÍDÁ^Á [-Á^!^] Áæç!^æ!^Áæ} á^ []^} Á^ []^} &^!^Á tools for in silico screening in chemical biologyÉÁRÁÖ@^ { ÁÖÁ^ &ÁJFIÁÇFGDKÁÍ ÉGÉ I ÉÉ