

研究论文

4,5,6-三取代嘧啶苯磺酰脲类化合物的生物活性、分子对接与3D-QSAR关系研究

郭万成 马翼 李永红 王素华 李正名*

(南开大学元素有机化学研究所 元素有机化学国家重点实验室 天津 300071)

收稿日期 2008-6-13 修回日期 2008-10-13 网络版发布日期 2009-4-2 接受日期 2008-11-18

摘要

用柔性分子对接方法(FlexX)将15个4,5,6-三取代嘧啶苯磺酰脲化合物以及3个不含5-位取代嘧啶苯磺酰脲化合物(分别为4,6-双取代嘧啶和4-取代嘧啶)和乙酰羟酸合成酶(AHAS)活性口袋进行了对接,对接程序预测的抑制剂和酶之间的相互作用能与抑制活性之间有一定的相关性,相关系数为0.660. 然后采用比较分子相似性指数分析(CoMSIA)对27个新型4,5,6-三取代嘧啶苯磺酰脲类化合物的除草活性进行三维定量构效关系(3D-QSAR)研究. 建立了三维定量构效关系CoMSIA模型,立体场、静电场和氢键的贡献分别为47.3%, 32.8%, 19.9%. 交叉验证系数 q^2 值为0.520. 根据CoMSIA模型的立体场、静电场、氢键给体场三维等值线图不仅直观地解释了结构与活性的关系,并且与用FlexX预测的结合模式相一致,证明了我们预测的结合模式是可靠的,为进一步设计高活性的标题化合物提供较好的理论指导.

关键词 [分子对接](#) [乙酰羟酸合成酶](#) [比较分子相似性指数分析](#) [三维定量构效关系](#) [三取代嘧啶苯磺酰脲](#)
[除草活性](#)

分类号

DOI:

通讯作者:

李正名 nkzml@vip.163.com

作者个人主页:

郭万成 马翼 李永红 王素华 李正名*

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF\(384KB\)](#)

▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)

▶ [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](#)

相关信息

▶ [本刊中包含“分子对接”的相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

· [郭万成,马翼,李永红,王素华,李正名](#)