

褪黑激素受体拮抗剂的三维定量构效关系研究

朱丽荔; 徐筱杰

北京大学化学与分子工程学院, 北京 100871

摘要:

采用两种分子场分析方法即比较分子场分析法 (CoMFA) 和比较分子相似因子分析法 (CoMSIA) 进行了37个褪黑激素受体拮抗剂的构效关系研究. 计算结果表明, 两种方法得到的构效关系模型都具有较好的预测能力. 在计算中, 还考察了不同格点距离和电荷计算方法对构效关系模型的影响. 通过分析分子场等值面图在空间的分布, 可以观察到叠合分子周围分子场特征对化合物活性的影响, 为设计新的褪黑激素拮抗剂提供了一些理论依据.

关键词: 褪黑激素 拮抗剂 三维定量构效关系 (3D-QSAR) 比较分子场分析法

收稿日期 2002-02-01 修回日期 2002-06-17 网络版发布日期 2002-12-15

通讯作者: 徐筱杰 Email: xiaojxu@chem.pku.edu.cn

本刊中的类似文章

Copyright © 物理化学学报

扩展功能

本文信息

[PDF\(1527KB\)](#)

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

- [▶ 褪黑激素](#)
- [▶ 拮抗剂](#)
- [▶ 三维定量构效关系 \(3D-QSAR\)](#)
- [▶ 比较分子场分析法](#)

本文作者相关文章

- [▶ 朱丽荔](#)
- [▶ 徐筱杰](#)