

5-芳基乙内酰胺类化合物在Pirkle型色谱柱上拆分的CoMFA研究

张兵,商志才,赵文娜,邹建卫,杨郭明,俞庆森

浙江大学化学系

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

摘要 用比较分子场分析法(CoMFA)研究了5-芳基乙内酰胺类化合物定量结构-保留关系。本研究以构象搜索所得的低能结构出发构建化合物分子的构象,并进行了全空间搜索。得到了较好的模型CoMFA的交叉验证回归系数 q^2 为0.764,模型的线性回归系数 r^2 为0.962。这些方程不仅有助于推测被识别剂和识别剂之间的结合方式,还可以定量地预测结构相近的类似物的拆分可能性,为设计合成新的识别剂和被识别剂都提供了一定的理论依据。

关键词 [比较分子力场分析法](#) [芳基乙内酰胺](#) [定量构效关系](#)

分类号 [0658](#)

Study on CoMFA of 5-Arylhdyantoin's Resolution with Pirkle Type Chiral Stationary Phase Column

Zhang Bing, Shang Zhicai, Zhao Wenna, Zou Jianwei, Yang Guoming, Yu Qingsen

Chemistry Department, Zhejiang University

Abstract Comparative molecular field analysis (CoMFA) was used to perform a quantitative structure-retention relationship study on resolution of a series of fifty 5-arylhydantoin's with the Pirkle type chiral stationary phase column. Satisfactory results were obtained after All Space Searching (ASS), with the leave-one out cross validation correlation coefficient of CoMFA $q^2 = 0.764$ and conventional $r^2 = 0.962$. The model will be useful to speculate the combining mode between the chiral stationary phase and the analogues as well as to quantitatively prognosticate the resolution of other 5-arylhydantoin analogues on Pirkle type chiral stationary phases.

Key words [CoMFA](#) [arylhydantoin's](#) [QUANTITATIVE STRUCTURE ACTIVITY RELATIONSHIP](#)

DOI:

通讯作者

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF\(0KB\)](#)

▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)

▶ [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](#)

▶ [复制索引](#)

▶ [Email Alert](#)

▶ [文章反馈](#)

▶ [浏览反馈信息](#)

相关信息

▶ [本刊中 包含 “比较分子力场分析法” 的相关文章](#)

▶ [本文作者相关文章](#)

- [张兵](#)
- [商志才](#)
- [赵文娜](#)
- [邹建卫](#)
- [杨郭明](#)
- [俞庆森](#)