

咪唑啉衍生物缓蚀剂的定量构效关系及分子设计

胡松青, 胡建春, 石鑫, 张军, 郭文跃

中国石油大学物理科学与技术学院, 山东 东营 257061

摘要:

采用量子化学密度泛函理论(DFT)及线性回归分析方法,对十一烷基咪唑啉衍生物缓蚀剂抗H₂S、CO₂腐蚀性能进行了定量构效关系(QSAR)研究.通过回归分析,筛选出了影响缓蚀剂缓蚀性能的主要因素,建立了QSAR模型,并使用留一法交叉验证对模型的稳定性及预测能力进行了分析.结果表明,电子转移参数 ΔN 、咪唑环上非氢原子静电荷之和 ΣQ_{ring} 及分子极化率 α 对咪唑啉类缓蚀剂的缓蚀性能有很大的贡献,所得模型的拟合相关系数(R²)和交叉验证相关系数(q²)分别为0.924和0.917,模型对此类缓蚀剂抗H₂S、CO₂腐蚀性能具有较好的预测效果.应用QSAR研究结果进行了分子设计,在理论上提出了一些具有较高抗H₂S、CO₂腐蚀性能的新型咪唑啉衍生物,为实验工作者合成新型缓蚀剂提供理论参考.

关键词: 缓蚀性能 咪唑啉衍生物 量化参数 定量构效关系 分子设计

收稿日期 2009-06-16 修回日期 2009-08-17 网络版发布日期 2009-09-29

通讯作者: 郭文跃 Email: wyguo@hdpu.edu.cn

本刊中的类似文章

1. 周原;梅虎;梁桂兆;李志良.取代基物化参数及其在药物定量构效关系中的应用[J].物理化学学报,2006,22(04):486-491
2. 彭涛;裴剑锋;周家驹.酪氨酸激酶抑制剂的三维定量构效关系研究[J].物理化学学报,2003,19(02):163-166
3. 王任小;高滢;刘亮;来鲁华.化合物的空间取向对CoMFA结果的影响[J].物理化学学报,1998,14(01):1-4
4. 梁桂兆;梅虎;周鹏;周原;李志良.三维原子场作用全息矢量用于二氢叶酸还原酶抑制剂及苦味二肽QSAR研究[J].物理化学学报,2006,22(03):388-390
5. 冯军,周家驹,李仁利.比较分子场分析研究吡嗪酮的体系的三维构效关系[J].物理化学学报,1995,11(03):206-210
6. 沈斌;陆忠华;迟学斌;吕海峰;任天瑞.GABA受体抑制剂的柔性原子受体模型研究[J].物理化学学报,2005,21(07):800-803
7. 乔颖欣;周家驹.带有分子轨道能量的3D-QSAR对*N*-氨基咪唑的研[J].物理化学学报,2006,22(02):209-214
8. 黄钦;侯廷军;徐筱杰.基于遗传算法的Caco-2细胞穿透系数的研究[J].物理化学学报,2005,21(04):372-377
9. 丁俊杰;丁晓琴;赵立峰;陈冀胜.二氢吡啶类化合物的三维定量构效关系[J].物理化学学报,2003,19(12):1108-1113
10. 冯长君;沐来龙;杨伟华;蔡可迎.有机污染物的生物富集因子与拓扑指数的数学模型[J].物理化学学报,2008,24(06):1053-1057
11. 梅虎 刘丽 杨力 李建 闫宁 王琴.原子类型电拓扑状态指数预测咪唑啉类缓蚀剂的抗癌性[J].物理化学学报,2009,25(04):747-751
12. 骆兆文,王丹丹,来鲁华,徐筱杰,李崇熙.雪花胺类化合物的三维构效关系研究[J].物理化学学报,1995,11(05):419-423
13. 骆兆文,邓巧临,来鲁华,徐筱杰,唐有祺.磷脂酶A₂及其复合物的分子动力学研究[J].物理化学学报,1995,11(07):622-626
14. 吴文娟;赖琮;郑康成;云逢存.抗癌性咪唑啉类缓蚀剂的定量构效关系[J].物理化学学报,2005,21(01):28-32
15. 王瑾玲;孙命;苏华庆;缪方明.咪唑-1-羟酸酯类化合物的构效关系研究[J].物理化学学报,1998,14(05):444-447
16. 朱丽荔;徐筱杰.褪黑激素受体拮抗剂的三维定量构效关系研究[J].物理化学学报,2002,18(12):1087-1092
17. 王宝雷;马宁;王建国;马翼;李正名;李永红.新磺酰脲类化合物除草活性的3D-QSAR分析[J].物理化学学报,2004,20(06):577-581

扩展功能

本文信息

PDF(434KB)

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

▶ 缓蚀性能

▶ 咪唑啉衍生物

▶ 量化参数

▶ 定量构效关系

▶ 分子设计

本文作者相关文章

▶ 胡松青

▶ 胡建春

▶ 石鑫

▶ 张军

▶ 郭文跃

18. 王任小;刘亮;来鲁华;唐有祺.凝血酶抑制剂的结构与活性的关系[J]. 物理化学学报, 1998,14(10): 887-892
19. 梅虎;周原;孙立力;李志良.一种新的氨基酸描述子及其在肽QSAR中的应用[J]. 物理化学学报, 2004,20(08): 821-825
20. 王任小;李维忠;来鲁华;唐有祺.酶-配体复合物亲和性的计算[J]. 物理化学学报, 1998,14(09): 826-832
21. 王任小;冯亚彬;来鲁华;唐有祺.磷脂酶A₂ 抑制剂的结构和活性关系[J]. 物理化学学报, 1998,14(10): 893-897
22. 胡亚兰;黄锋;蒋辉;范崇旭;陈常英;陈冀胜. σ -芋螺毒素构效关系与分子设计[J]. 物理化学学报, 2005,21(05): 474-478
23. 魏卓 张怀 崔巍 计明娟.马来酰胺类糖原合成酶激酶-3 β 抑制剂的分子对接和三维定量构效关系[J]. 物理化学学报, 2009,25(05): 890-896
24. 蒋玉仁;秦伟.苯并噻酮衍生物的3D-QSAR分析[J]. 物理化学学报, 2008,24(10): 1859-1863
25. 黄忠平;潘锦红;蔡国强;俞庆森;林瑞森.方酸衍生物的光敏性与结构关系的理论研究[J]. 物理化学学报, 1998,14(06): 557-561
26. 陈红明;周家驹;谢桂荣;任天瑞.一种基于虚拟受体模型的定量构效关系研究方法[J]. 物理化学学报, 1997,13(07): 626-631
27. 杨光富;刘华银;杨秀凤;杨华铮.1,2,4-三唑并[1, 5-a]嘧啶-2-磺酰胺类除草剂的CoMFA研究[J]. 物理化学学报, 1999,15(02): 190-192
28. 仝建波;周鹏;张生万;梁桂兆;田菲菲;李美萍;李声时.三维全息原子场作用矢量用于HEPT类抗艾滋病药物的QSAR研究[J]. 物理化学学报, 2006,22(06): 721-725
29. 邹霞娟;来鲁华;金桂玉;黄桂琴.新型含吡嗪酮基双酰胺类化合物的3D-QSAR研究[J]. 物理化学学报, 2002,18(06): 513-516
30. 张华北;李波;戴梅.[⁹⁹Tc^m(NO)Cl(PL)₂]⁺类配合物的定量构效关系[J]. 物理化学学报, 2003,19(05): 460-463
31. 潘咏梅;计明娟.基于遗传算法的PTP1B抑制剂的二维定量构效关系研究[J]. 物理化学学报, 2003,19(08): 695-700
32. 钱力;沈勇;陈锦灿;郑康成.抗癌性吡啶喹啉衍生物3D-QSAR研究及其分子设计[J]. 物理化学学报, 2006,22(11): 1372-1376
33. 仝建波;张生万.一种新的三维氨基酸描述子及其在肽类药物QSAR中的应用[J]. 物理化学学报, 2007,23(01): 37-43
34. 宋哲;刘涛;刘伟;朱鸣华;王晓钢.抗原肽与MHC分子相互作用的QSAR模型研究[J]. 物理化学学报, 2007,23(02): 198-205
35. 朱龙观, 俞庆森, 陈凯先, 蔡国强, 林瑞森.喹诺酮类N₁位定量构效关系研究[J]. 物理化学学报, 1995,11(10): 925-928
36. 陈渊, 袁哲明, 周玮, 熊兴耀.基于地统计学与支持向量回归的QSAR建模[J]. 物理化学学报, 2009,25(08): 1587-1592