

取代基物化参数及其在药物定量构效关系中的应用

周原;梅虎;梁桂兆;李志良

重庆大学生物工程教育部与重庆市重点实验室;重庆大学生物工程学院;重庆大学化学化工学院, 重庆 400044;湖南工程学院化学化工系, 湖南 湘潭 411101

摘要:

把取代基电性、立体及疏水性物化参数组合建立一种新取代基描述方法,对环尿素类和N,N-二甲基-2-溴苯乙胺类衍生物进行结构表征.对训练样本集通过逐步回归筛选变量,所建多元线性回归方程R²分别为0.853和0.960,留一法交互检验R_{cv}²分别为0.723和0.901;用预测集样本作外部预测,所得Q_{ext}²分别为0.7617和0.7653.结果显示:环尿素类化合物结构中苯环邻位立体、间位疏水、对位疏水及立体因素对该类药物抗HIV活性产生阻抑作用;N,N-二甲基-2-溴苯乙胺类苯环上取代基立体因素及对位给电子效应有利于提高肾上腺素能阻断活性.

关键词: 环尿素类化合物 N,N-二甲基-2-溴苯乙胺类衍生物 取代基物化参数 定量构效关系

收稿日期 2005-07-15 修回日期 2005-12-12 网络版发布日期 2006-04-10

通讯作者: 李志良 Email: zlli2662@163.com

本刊中的类似文章

Copyright © 物理化学学报

扩展功能

本文信息

PDF(208KB)

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

▶ 环尿素类化合物
▶ N,N-二甲基-2-溴苯乙胺类衍生物
▶ 取代基物化参数
▶ 定量构效关系

本文作者相关文章

▶ 周原
▶ 梅虎
▶ 梁桂兆
▶ 李志良