

酪氨酸激酶抑制剂的三维定量构效关系研究

彭涛;裴剑锋;周家驹

中国科学院过程工程研究所, 北京 100080

摘要:

利用柔性原子受体模型(FLARM)方法对一系列的异黄酮和喹诺酮衍生物表皮生长因子受体酪氨酸激酶抑制剂进行了三维定量构效关系研究,得到了合理的构效关系模型.FLARM方法的计算结果还给出了虚拟的受体模型,该模型说明了抑制剂与受体之间可能的相互作用.由该虚拟受体模型得到的受体-配体相互作用与Novartis药效团模型比较类似.

关键词: 酪氨酸激酶抑制剂 三维定量构效关系 柔性原子受体模型(FLARM)

收稿日期 2002-05-28 修回日期 2002-07-10 网络版发布日期 2003-02-15

通讯作者: 周家驹 Email: jjzhou@lcc.icm.ac.cn

本刊中的类似文章

1. 彭涛;周家驹.基于药效团的三维数据库搜索[J]. 物理化学学报, 2003,19(09): 886-888

扩展功能

本文信息

[PDF\(1365KB\)](#)

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

▶ [酪氨酸激酶抑制剂](#)

▶ [三维定量构效关系](#)

▶ [柔性原子受体模型\(FLARM\)](#)

本文作者相关文章

▶ [彭涛](#)

▶ [裴剑锋](#)

▶ [周家驹](#)