

带有分子轨道能量的3D-QSAR对N-氨基咪唑的研

乔颖欣; 周家驹

中国科学院过程工程研究所, 生物化学国家重点实验室, 北京 100083; 中国科学院研究生院, 北京 100049

摘要:

N-氨基咪唑(NAIMs)能通过三种不同的作用方式抑制HIV-1的复制. 用比较分子场 (CoMFA) 方法对一系列有共同骨架的NAIM分子建立3D-QSAR模型. 与以往模型不同的是, 在偏最小二乘 (PLS) 分析中尝试引入分子轨道能量的信息来研究生物活性与分子轨道能量的关系. 结果得到了几个模型, 分子轨道能量对模型的贡献能为21.7%, 轨道HOMO5对模型的贡献最大.

关键词: N-氨基咪唑 抑制HIV-1复制 三维定量构效关系 分子轨道能量 比较分子场方法 MOPAC6/PM3

收稿日期 2005-07-14 修回日期 2005-10-14 网络版发布日期 2006-01-22

通讯作者: 周家驹 Email: jjzhou@home.ipe.ac.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(278KB)

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

▶ N-氨基咪唑

▶ 抑制HIV-1复制

▶ 三维定量构效关系

▶ 分子轨道能量

▶ 比较分子场方法

▶ MOPAC6/PM3

本文作者相关文章

▶ 乔颖欣

▶ 周家驹