

## 毒蕈碱受体激动剂的三维定量构效关系研究

朱军; 牛彦; 吕雯; 雷小平

北京大学药学院药物化学系, 北京 100083

### 摘要:

采用比较分子场分析法(CoMFA)研究了55个四氢吡啶类毒蕈碱受体激动剂的三维定量构效关系(3D-QSAR), 建立了具有较强预测能力的3D-QSAR模型. 所得模型的交叉验证相关系数( $q^2$ )为0.507, 常规相关系数( $R^2$ )为0.982, 标准方差为0.218, 说明系列化合物分子周围立体场和静电场的分布与生物活性间存在良好的相关性. 模型不仅很好地预测了训练集和测试集化合物的活性, 而且为设计活性更高的受体激动剂提供了理论依据.

关键词: M1受体 激动剂 比较分子场分析法 构效关系

收稿日期 2005-04-20 修回日期 2005-06-13 网络版发布日期 2005-11-15

通讯作者: 雷小平 Email: leixp@bjmu.edu.cn

### 本刊中的类似文章

1. 吕雯, 吕炜, 牛彦, 雷小平. 毒蕈碱型M<sub>1</sub>受体的同源模建和分子对接[J]. 物理化学学报, 2009, 25(07): 1259-1266

扩展功能

本文信息

[PDF\(331KB\)](#)

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

▶ [M1受体](#)

▶ [激动剂](#)

▶ [比较分子场分析法](#)

▶ [构效关系](#)

本文作者相关文章

▶ [朱军](#)

▶ [牛彦](#)

▶ [吕雯](#)

▶ [雷小平](#)