

## 从药物的三维分子结构预测人体小肠吸收

胡桂香; 邹建卫; 蒋勇军; 王艳花; 俞庆森

浙江大学, 宁波理工学院分子设计与营养工程市重点实验室, 宁波 315104

### 摘要:

在口服药物的发展过程中, 人体小肠吸收的预测是候选药物设计、优化和选择的一个主要目标. VolSurf/GRID计算方法作为一个新的工具被用来预测被测化合物的人体小肠吸收, 以及测定人体小肠吸收所必需的重要的分子特征. 被测化合物包括112个结构不同的类似药物的化合物. 使用偏最小二乘判别分析方法在实验数据和人体小肠吸收的理论分子特征之间建立相关性. 建立的两个模型之间具有较高的一致性. 小肠吸收实验数据与分子特征之间好的相关性 ( $r^2=0.82$ ,  $q^2=0.67$ ) 表明, 从化合物的三维分子结构能够预测人体小肠吸收. 有利于人体小肠吸收的药物分子特征包括, 分子量中心与亲水区重心的不平衡性, 较大的疏水区域以及分子内较少的氢键给体.

关键词: 人体小肠吸收 (HIA) 三维 VolSurf 主成分分析 (PCA) 偏最小二乘法 (PLS)

收稿日期 2003-10-17 修回日期 2004-01-09 网络版发布日期 2004-05-15

通讯作者: 胡桂香 Email: hugx@nit.net.cn

### 本刊中的类似文章

### 扩展功能

#### 本文信息

[PDF\(668KB\)](#)

#### 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

- ▶ [人体小肠吸收 \(HIA\)](#)
- ▶ [三维](#)
- ▶ [VolSurf](#)
- ▶ [主成分分析 \(PCA\)](#)
- ▶ [偏最小二乘法 \(PLS\)](#)

#### 本文作者相关文章

- ▶ [胡桂香](#)
- ▶ [邹建卫](#)
- ▶ [蒋勇军](#)
- ▶ [王艳花](#)
- ▶ [俞庆森](#)