

## 二氢吡啶类化合物的三维定量构效关系

丁俊杰; 丁晓琴; 赵立峰; 陈冀胜

北京药物化学研究所, 北京 102205

### 摘要:

通过分子力学和量子化学计算, 得出两种二氢吡啶衍生物的低能构象, 再应用比较分子力场分析方法(CoMFA)和比较分子相似性指数分析方法(CoMSIA)分别对两种构象的43个二氢吡啶衍生物进行3D-QSAR研究. 计算结果表明, 用两种方法建立的两种构象的构效关系模型均有较好的预测能力. 通过分析CoMFA和CoMSIA的系数等势图, 直观地了解二氢吡啶衍生物的结构对生物活性的影响, 为进一步设计高活性的二氢吡啶衍生物提供一定的理论依据.

关键词: 二氢吡啶(DHP) 钙离子通道拮抗剂 三维定量构效关系(3D-QSAR) 比较分子力场分析(CoMFA) 比较分子相似性指数分析(CoMSIA)

收稿日期 2003-05-12 修回日期 2003-07-25 网络版发布日期 2003-12-15

通讯作者: 丁晓琴 Email: dingxq@cetin.net.cn

本刊中的类似文章

扩展功能

本文信息

[PDF\(1537KB\)](#)

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

- ▶ [二氢吡啶\(DHP\)](#)
- ▶ [钙离子通道拮抗剂](#)
- ▶ [三维定量构效关系\(3D-QSAR\)](#)
- ▶ [比较分子力场分析\(CoMFA\)](#)
- ▶ [比较分子相似性指数分析\(CoMSIA\)](#)

本文作者相关文章

- ▶ [丁俊杰](#)
- ▶ [丁晓琴](#)
- ▶ [赵立峰](#)
- ▶ [陈冀胜](#)