

胆固醇酯转运蛋白抑制剂的3D-QSAR模型

颜琳芳 胡桂香 徐晶 赵文娜 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, 浙江 宁波 315100

摘要:

利用VolSurf参数和比较分子场分析(CoMFA)方法对N,N-二取代三氟-3-氨基-2-丙醇衍生物类胆固醇酯转运蛋白抑制剂进行了三维定量构效关系(3D-QSAR)模型研究, 均得到较好的结果, 训练集模型具有良好的预测能力. VolSurf参数分析表明抑制活性高的分子必须具有合适的亲水性、多的氢键给体和少的氢键受体; 在一定范围内, 分子量、表面光滑且非球性高的分子抑制活性高; 高疏水性以及质量中心与疏水区中心的高不平衡性对活性是不利因素. CoMFA结果表明, 立体作用对活性的影响较静电作用稍强, N-苯基取代基苯氧基的间位体积大且正电性强的基团对活性有利, N-苄基取代基的间位体积大且合适的电负性对活性有利, 而苄基的对位立体位阻的增加则对活性不利. VolSurf参数提供了分子整体性质信息, CoMFA提供了取代基信息, 两者互为补充, 对该类抑制剂新化合物的设计具有指导意义.

关键词: 胆固醇酯转运蛋白 抑制剂 VolSurf CoMFA 3D-QSAR

收稿日期 2008-07-08 修回日期 2008-10-08 网络版发布日期 2008-11-04

通讯作者: 胡桂香 Email: hugx@nit.zju.edu.cn

本刊中的类似文章

扩展功能

本文信息

PDF(526KB)

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

▶ 胆固醇酯转运蛋白
▶ 抑制剂
▶ VolSurf
▶ CoMFA
▶ 3D-QSAR

本文作者相关文章

▶ 颜琳芳
▶ 胡桂香
▶ 徐晶
▶ 赵文娜
▶ 俞庆森