

引用信息: SHI Ya-Wei; LIU Zhen-Ming; JIN Hong-Wei; ZHANG Liang-Ren; ZHANG Li-He. Acta Phys. -Chim. Sin., 2007, 23(09): 1393-1398 [石雅玮;刘振明;金宏威;张亮仁;张礼和. 物理化学学报, 2007, 23(09): 1393-1398]

本期目录 | 在线预览 | 过刊浏览 | 高级检索

[打印本页] [关闭]

研究论文

二酮酸类HIV-1整合酶抑制剂的定量构效关系

石雅玮; 刘振明; 金宏威; 张亮仁; 张礼和

北京大学药学院天然药物及仿生药物国家重点实验室, 北京 100083

摘要:

应用遗传函数分析法(GFA)和分子场分析法(MFA)对一系列二酮酸类整合酶抑制剂分别进行了二维和三维定量构效关系研究, 并对随机选择的5个化合物组成的测试集进行了预测, 外在预测的 r^2_{pred} 值分别达到0.987和0.759, 表明模型具有良好的预测能力, 同时利用药效团分析的方法, 验证了QSAR (quantitative structure-activity relationship)模型, 并概括了疏水作用对抑制剂活性的重要影响. 研究表明, 电性描述符(Apol)对活性有重要影响, 意味着抑制剂与金属离子的螯合作用, 同时空间和结构因素特别是疏水作用也对活性有重要作用. 利用这些规律进行了分子设计, 在理论上获得了一些具有较高抑制剂活性的新的二酮酸类衍生物, 并期待实验证实.

关键词: HIV-1整合酶抑制剂 二酮酸 遗传函数分析法 分子场分析法 药效团

收稿日期 2007-03-05 修回日期 2007-05-25 网络版发布日期 2007-07-03

通讯作者: 张亮仁 Email: liangren@bjmu.edu.cn

本刊中的类似文章

1. 刘春莉;李春华;陈慰祖;王存新.用分子模拟方法研究HIV-1整合酶与咖啡酰基类抑制剂的相互作用[J]. 物理化学学报, 2005,21(11): 1229-1234

Copyright © 物理化学学报

扩展功能

本文信息

PDF(745KB)

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

▶ HIV-1整合酶抑制剂

▶ 二酮酸

▶ 遗传函数分析法

▶ 分子场分析法

▶ 药效团

本文作者相关文章

▶ 石雅玮

▶ 刘振明

▶ 金宏威

▶ 张亮仁

▶ 张礼和