

鬼臼毒素衍生物的量子化学研究

何峰,刘宗潮,郑康成,云逢存

中山医科大学化学教研室;中山医科大学肿瘤研究所.广州(510000);中山大学 化学学院

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

**摘要** 对若干个鬼臼毒素衍生物进行了量子化学计算,根据其电子结构及有关分析结果,结合它们对体外L1210白血病细胞生长的抑制活性(IC50),讨论了它们的活性部位及构效关系,发现具有较高活性的化合物分子中有三个重要部位:C4位为有效的修饰位点;B环及E环是重要的活性部位,其中B环是接受电子的主要活性部位,其正电性越高,活性越强;E环及其4'位酚羟基氧的负电性越高,活性越强。

**关键词** [鬼臼毒素](#) [抗癌活性](#) [定量构效关系](#) [抑制\(生物科学\)](#) [量子化学](#)

分类号 [0641](#)

## A quantum chemistry study of podophyllotoxin derivatives

He Feng,Liu Zongchao,Zheng Kangcheng,Yun Fengcun

Sun Yat-sen Univ Med Sci., Cancer Res Inst.Guangzhou(510000)

**Abstract** A number of podophyllotoxin derivatives were analyzed by AM1 method. Some information from the calculation results and the inhibition of L1210 indicate that there are three structurally distince domains: The C4 position is an effective modified point. The B ring and E ring are important active centers. The results also show that the hole of positive charge in B ring easily combines with an acceptor within the molecule. The E ring along with its C4'xyl group is an important center of negative electricity.

**Key words** [ANTINEOPLASTIC ACTIVITY](#) [QUANTITATIVE STRUCTURE ACTIVITY RELATIONSHIP](#) [INHIBITION \(BIOLOGICAL SCIENCE\)](#) [QUANTUM CHEMISTRY](#)

DOI:

通讯作者

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF\(0KB\)](#)

▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)

▶ [参考文献](#)

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](#)

▶ [复制索引](#)

▶ [Email Alert](#)

▶ [文章反馈](#)

▶ [浏览反馈信息](#)

相关信息

▶ [本刊中 包含“鬼臼毒素”的  
相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

- [何峰](#)
- [刘宗潮](#)
- [郑康成](#)
- [云逢存](#)