



### 1,5-二芳基吡唑类环氧合酶-1选择性抑制剂的CoMFA研究

闵勇<sup>1,2</sup>, 易平<sup>3</sup>, 古昆<sup>1</sup>, 邱明华<sup>3</sup>

1. 云南大学, 应用化学系, 云南, 昆明, 650091;
2. 红河学院, 化学系, 云南, 蒙自, 661100;
3. 中国科学院, 昆明植物研究所, 植物化学与西部植物资源持续利用国家重点实验室, 云南, 昆明, 650204

### The COMFA study on 1,5-diarylpyrazole class of cyclooxygenase-2 selective inhibitors

MIN Yong<sup>1,2</sup>, YI Ping<sup>3</sup>, GU Kun<sup>1</sup>, QIU Min-hua<sup>3</sup>

1. Department of Applied Chemistry, Yunnan University, Kunming 650091, China;
2. Department of Chemistry, Honghe College, Mengzi 661100, China;
3. Kunming Institute of Botany, Chinese Academy of Science, Kunming 650204, China

- 摘要
- 参考文献
- 相关文章

全文: PDF (855 KB) HTML ( KB) 输出: BibTeX | EndNote (RIS) 背景资料

**摘要** 目的:应用比较分子力场法(CoMFA)研究一系列1,5-二芳基吡唑类对环氧合酶-1选择性抑制剂三维定量构效关系,为进一步药物设计提供理论依据,方法和结果:在研究的14个化合物中,用比较分子力场法得到1个CoMFA模型,交叉验证系数 $q^2$ 为0.818,具有较高的预测能力及合理性,非交叉验证模型相关系数 $r^2$ 为0.958,标准偏差为0.077, $F$ 为79.834;并依据模型设计,预测了几个具有较高活性的化合物.结论:此模型对设计和预测高活性的1,5-二芳基吡唑类环氧合酶-1选择性抑制剂有一定可靠性.

**关键词:** 比较分子力场法(CoMFA) 1,5-二芳基吡唑类环 环氧合酶-1选择性抑制剂

**Abstract:** CoMFA(comparative molecular field analysis)models of the 1,5-diarylpyrazoles of cyclooxygenase-1 selective inhibitors was established using the advanced 3D-QSAR method in order to give a theoretical basis to design new inhibitors.The crossvalidated coefficient  $q^2$  of one model reached 0.818,the non-cross-validated coefficient  $r^2$  was 0.958,the standard deviation was 0.077 and  $F$  was 79.834.The CoMFA models of 1,5-diarylpyrazoles reveal the relationship between COX-1 bioactivity and structure,and are helpful to further design new inhibitors with high bioactivity.

**Key words:** CoMFA 1,5-diarylpyrazoles cyclooxygenase-1 selective inhibitors

收稿日期: 2005-01-15;

基金资助:中国科学院昆明植物研究所植物化学与西部植物资源持续利用国家重点实验室基金资助

引用本文:

闵勇,易平,古昆等. 1,5-二芳基吡唑类环氧合酶-1选择性抑制剂的CoMFA研究[J]. 云南大学学报(自然科学版), 2005, 27(5): 429-433.

MIN Yong,YI Ping,GU Kun et al. The COMFA study on 1,5-diarylpyrazole class of cyclooxygenase-2 selective inhibitors[J]. , 2005, 27(5): 429-433.

没有本文参考文献

没有找到本文相关文章

#### 服务

- ▶ 把本文推荐给朋友
- ▶ 加入我的书架
- ▶ 加入引用管理器
- ▶ E-mail Alert
- ▶ RSS

#### 作者相关文章

- ▶ 闵勇
- ▶ 易平
- ▶ 古昆
- ▶ 邱明华

版权所有 © 《云南大学学报(自然科学版)》编辑部

编辑出版：云南大学学报编辑部（昆明市翠湖北路2号，650091）

电话：0871-5033829(传真) 5031498 5031662 E-mail: yndxxb@ynu.edu.cn yndxxb@163.com