

研究论文

原子类型电拓扑指数在脂肪醇类化合物毒性预测研究中的应用

刘 丽 梅 虎* 皮喜田 龙瑞才 李 建 李志良

(重庆大学生物工程学院 重庆 400030)

收稿日期 2008-1-7 修回日期 2008-3-10 网络版发布日期 2008-8-28 接受日期 2008-4-21

摘要

采用原子类型电拓扑指数(ETSIAT)为结构描述子,对梨形四膜虫、番茄、红蜘蛛、发光细菌荧光素酶、呆鲮鱼以及鼠的脂肪醇毒性进行了定量构效关系(QSAR)研究.在偏最小二乘法建立QSAR模型的基础上,采用内部和外部两种验证方法对模型进行验证.研究表明:ETSIAT可以很好地表征脂肪醇与多种生物毒性相关的结构信息,所建模型具有良好的稳定性和外部预测能力.偏最小二乘模型分析结果显示:疏水性可能是影响脂肪醇毒性大小的主要因素,其毒性随C链长度的增加而增强,且相同C原子数的直链脂肪醇毒性明显高于支链脂肪醇;由于空间位阻效应,长链脂肪醇与短链脂肪醇可能存在不同的毒性作用机理.

关键词

[定量构效关系](#) [原子类型电拓扑指数](#) [脂肪醇](#) [毒性](#)

分类号

DOI:

通讯作者:

梅 虎 meihu@cqu.edu.cn

作者个人主页:

刘 丽 梅 虎* 皮喜田 龙瑞才 李 建 李志良

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF\(329KB\)](#)

▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)

▶ [参考文献\[PDF\]](#)

▶ [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](#)

▶ [引用本文](#)

▶ [Email Alert](#)

相关信息

▶ [本刊中 包含 “](#)

[定量构效关系” 的相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

· [刘 丽 梅 虎* 皮喜田 龙瑞才 李 建 李志良](#)