

研究论文

一种新型手性分子电性矩边矢量(Vmedc)的设计及其应用

陈国华*,a,b 夏之宁*,a 陆 瑶b 廖立敏a

舒 茂a 孙家英a 李志良a

(a重庆大学生物工程学院/化学化工学院 重庆 400044)

(b四川理工学院材料与化学工程系 四川自贡 643000)

收稿日期 2007-12-26 修回日期 2008-4-16 网络版发布日期 2008-10-22 接受日期 2008-5-20

摘要

根据分子中不同类型原子间电相互作用的不同,文中提出了一种手性分子电矩边矢量(Vmedc),进一步拓展分子电矩边性矢量(Vmed)使用范围.为检测该手性描述矢量的结构表达特性和模型预测能力,分别对32个培哌普利拉类血管紧张素转化酶(ACE)抑制剂的对映结构体和7对苯基哌啶类 σ -受体抑制剂进行考察.32个ACE抑制剂多元逐步回归系数 $R=0.913$ ($R^2=0.834$, $SD=0.768$, $F=33.875$),留一法交互检验为 $R_{cv}=0.877$ ($R_{cv2}=0.769$, $SD_{cv}=0.906$, $F_{cv}=22.473$),具有较强预测能力;继而用BP神经网络,对60组随机样本(23:9)进行留分法分析取得较好结果,训练集平均为: $R_{Training}=0.931$ ($R_{Training2}=0.967$),预测集为: $R_{cv}=0.918$ ($R_{cv2}=0.842$);而对14个 σ -受体抑制剂多元回归($R=0.955$, $R_{cv2}=0.849$)获得与文献一致结果.再用Fisher线性判别方法和BP神经网络对ACE抑制剂进行判别分析,其活性分类88.89%正确(仅9号错误),非活性分类100.0%正确,总分类正确率为96.87%.两个数据集测试证明该方法与其它文献方法相当,这为定量构效关系(QSAR)研究提供一种新选择,扩充了Vmed描述矢量应用范围.

关键词 [ACE抑制剂](#) [手性](#) [Vmedc](#) [苯基哌啶类](#) [反传神经网络](#) [Fisher判别分析](#)

分类号

DOI:

通讯作者:

陈国华 zlli-cqu@163.com, chgh29@163.com, zlli2662@163.com

作者个人主页:

陈国华*;a;b 夏之宁*;a 陆 瑶b 廖立敏a

舒 茂a 孙家英a 李志良a

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF\(331KB\)](#)

▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)

▶ [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“ACE抑制剂”的相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

· [陈国华*,a,b 夏之宁*,a 陆 瑶b 廖立敏a](#)