

## 马来酰胺类糖原合成酶激酶-3 $\beta$ 抑制剂的分子对接和三维定量构效关系

魏卓 张怀 崔巍 计明娟

中国科学院研究生院化学与化学工程学院, 北京 100049; 中国科学院研究生院计算地球动力学重点实验室, 北京 100049

### 摘要:

通过分子对接和三维定量构效关系(3D-QSAR)两种方法来确定两类马来酰胺类的糖原合成酶激酶-3 $\beta$ (GSK-3 $\beta$ )抑制剂的结合方式. 首先, 用分子对接确定抑制剂与GSK-3 $\beta$ 结合模式及其相互作用; 然后用比较分子力场分析法(CoMFA)与比较分子相似性指数分析法(CoMSIA)对48个化合物做三维定量构效关系的分析. 两种方法得出的交互验证回归系数分别为0.669(CoMFA)和0.683(CoMSIA), 证明该模型具有很好的统计相关性, 同时也说明该模型具有较高的预测能力. 根据该模型提供的信息, 设计出9个预测活性较好的分子.

关键词: 糖原合成酶激酶3 $\beta$  三维定量构效关系 比较分子力场分析法 比较分子相似性指数分析法 分子对接

收稿日期 2008-10-20 修回日期 2008-12-04 网络版发布日期 2009-02-16

通讯作者: 计明娟 Email: jmj@gucas.ac.cn

本刊中的类似文章

Copyright © 物理化学学报

扩展功能

本文信息

PDF(942KB)

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

▶ 糖原合成酶激酶3 $\beta$   
▶ 三维定量构效关系  
▶ 比较分子力场分析法  
▶ 比较分子相似性指数分析法  
▶ 分子对接

本文作者相关文章

▶ 魏卓  
▶ 张怀  
▶ 崔巍  
▶ 计明娟