

## 比较分子场分析研究吡嗪酮的体系的三维构效关系

冯军, 周家驹, 李仁利

中国科学院化工冶金研究所计算机化学开放实验室|北京 100080|北京医科大学|北京100084

摘要:

用比较分子场分析 (CoMFA) 法对两个体系的化合物进行了研究, 得到了预报能力较强的模型. 初步的研究表明, 作为一种三维定量构效 (3D-QSAR) 方法, 它能够揭示分子三维结构对活性的贡献, 有较广阔的应用前景.

关键词: CoMFA 三位定量构效关系 吡嗪酮 硫马唑 异硫马唑

收稿日期 1993-10-09 修回日期 1994-02-14 网络版发布日期 1995-03-15

通讯作者: 周家驹 Email:

### 本刊中的类似文章

1. 王任小;高滢;刘亮;来鲁华.化合物的空间取向对CoMFA结果的影响[J]. 物理化学学报, 1998,14(01): 1-4
2. 刘亮;王任小;来鲁华;李崇熙.促生长激素释放素三维定量构效关系及药效团模型[J]. 物理化学学报, 1997,13(12): 1090-1096
3. 丁俊杰;丁晓琴;赵立峰;陈冀胜.二氢吡啶类化合物的三维定量构效关系[J]. 物理化学学报, 2003,19(12): 1108-1113
4. 黄常康;高莹;刘振明;刘莹;来鲁华.吡咯烷类胞液型磷脂酶A2抑制剂的比较分子力场分析[J]. 物理化学学报, 2003,19(01): 79-81
5. 王宝雷;马宁;王建国;马翼;李正名;李永红.新磺酰胺类化合物除草活性的3D-QSAR分析[J]. 物理化学学报, 2004,20(06): 577-581
6. 陆爱军;刘冰;刘海波;周家驹.GABA<sub>A</sub>五种亚型受体与BZ配基的3D-QSAR研究[J]. 物理化学学报, 2004,20(05): 488-493
7. 颜琳芳 胡桂香 徐晶 赵文娜 俞庆森.胆固醇酯转运蛋白抑制剂的3D-QSAR模型[J]. 物理化学学报, 2008,24(12): 2249-2256
8. 邹霞娟;来鲁华;金桂玉;黄桂琴.新型含吡嗪酮基双酰胺类化合物的3D-QSAR研究[J]. 物理化学学报, 2002,18(06): 513-516

扩展功能

本文信息

PDF(792KB)

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

▶ CoMFA

▶ 三位定量构效关系

▶ 吡嗪酮

▶ 硫马唑

▶ 异硫马唑

本文作者相关文章

▶ 冯军

▶ 周家驹

▶ 李仁利