

## 磺胺基羟肟酸类HDAC抑制剂三维定量构效关系

刘冰; 陆爱军; 廖晨钟; 刘海波; 周家驹

中国科学院过程工程研究所生化工程国家重点实验室, 北京 100080; 中国科学院研究生院, 北京 100039

摘要:

组蛋白去乙酰化酶(HDAC)对染色质分布和基因调节起着重要的作用,也是治疗癌症和其它疾病的新靶点.羟肟酸类抑制剂是目前研究最多的组蛋白去乙酰化酶抑制剂.应用比较分子力场(CoMFA)法对一系列磺胺基羟肟酸类HDAC抑制剂进行了结构活性关系研究,得到的模型具有较高的交叉验证系数( $q^2=0.704$ ).并在此基础上,建立了非交叉验证的偏最小二乘分析(PLS)模型.用该模型对随机选择的6个化合物组成的测试集进行了预测,得到了令人满意的结果.所建模型具有良好的预测能力.本研究对于设计高活性的HDAC抑制剂及抗癌药物都有指导意义.

关键词: 3D-QSAR 比较分子力场 组蛋白去乙酰化酶 磺胺基羟肟酸 分子对接

收稿日期 2004-08-18 修回日期 2004-10-09 网络版发布日期 2005-03-15

通讯作者: 周家驹 Email: jjzhou@home.ipe.ac.cn

### 本刊中的类似文章

1. 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
2. 王瑾玲; 孙命; 苏华庆; 缪方明. 咪唑-1-羟酸酯类化合物的构效关系研究[J]. 物理化学学报, 1998, 14(05): 444-447
3. 朱丽荔; 徐筱杰. 褪黑激素受体拮抗剂的三维定量构效关系研究[J]. 物理化学学报, 2002, 18(12): 1087-1092
4. 王宝雷; 马宁; 王建国; 马翼; 李正名; 李永红. 新磺酰脲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
5. 孙倪悦; 陆涛; 陈亚东; 郝兰虎; 许岩; 李瑞君. 3D-QSAR和分子对接研究吡啶类细胞周期蛋白激酶抑制剂的选择性[J]. 物理化学学报, 2009, 25(04): 645-654
6. 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
7. 邹霞娟; 来鲁华; 金桂玉; 黄桂琴. 新型含哒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
8. 钱力; 沈勇; 陈锦灿; 郑康成. 抗癌性吡啶喹啉生物3D-QSAR研究及其分子设计[J]. 物理化学学报, 2006, 22(11): 1372-1376

扩展功能

本文信息

PDF(1569KB)

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

▶ 3D-QSAR

▶ 比较分子力场

▶ 组蛋白去乙酰化酶

▶ 磺胺基羟肟酸

▶ 分子对接

本文作者相关文章

▶ 刘冰

▶ 陆爱军

▶ 廖晨钟

▶ 刘海波

▶ 周家驹