

以ALS为靶标的新型除草剂的分子设计、合成及生物活性研究 8: Hansch方法与CoMFA方法相结合研究稠杂磺酰胺类除草剂的构效关系

杨光富,刘华银,杨秀凤,杨华铮

南开大学元素有机化学研究所.天津(300071);南开大学元素有机化学国家重点 实验实

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

摘要

采用Hansch方法和CoMAF方法从二维及三维空间上对三唑并嘧啶磺酰胺类除草剂的结构与活性关系进行了系统研究,结果发现化合物的立体及电学性质对除草活性有重要影响.化合物要保持高活性需满足合适的立体要求及酸性.此外,研究工作表明Hansch方法和CoMFA方法在一起使用可以更好地反映出药物分子的构效关系。

关键词 [除草剂](#) [分子设计](#) [生物活性](#) [磺酰胺P](#) [三唑P](#) [嘧啶P](#) [结构与性能关系](#)

分类号 [0627](#)

Design,syntheses and biological activity of novel herbicides targeting als 8: Studies on structure-activity relationships of fused heterocyclic sulfonamide herbicides combined hansch analyses and CoMFA method

Yang Guangfu,Liu Huayin,Yang Xiufeng,Yang Huazheng

Nankai Univ, Elementoorgan Chem Lab.Tianjin(300071)

Abstract Two dimensional and three dimensional structure - activity relationships of herbicidal triazolopyrimidinyl sulfonamides were studied using Hansch and CoMFA method. The results show that the electronic property and stereo - structure have an important impact on the herbicidal activity. A suitable acidity and steric effect were required for higher activity. Furthermore, the studies also indicate that application Hansch and CoMAF method simultaneously can reflect more completely the structure - activity relationships of drug molecules.

Key words [HERBICIDES](#) [MOLECULAR DESIGN](#) [BIOLOGICAL ACTIVITY](#) [SULFAMIDE P](#) [PYRRODIAZOLE P](#) [PYRIMIDINE P](#) [STRUCTURE AND PROPERTY CORRELATION](#)

DOI:

通讯作者

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF\(314KB\)](#)

▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)

▶ [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](#)

▶ [复制索引](#)

▶ [Email Alert](#)

▶ [文章反馈](#)

▶ [浏览反馈信息](#)

相关信息

▶ [本刊中 包含“除草剂”的
相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

· [杨光富](#)

· [刘华银](#)

· [杨秀凤](#)

· [杨华铮](#)