

论文

药物透过血脑屏障的3D-QSPR:H₂受体拮抗剂的CoMFA和EVA分析

朱七庆;屈凌波;雷新胜;郭宗儒

中国医学科学院、中国协和医科大学药物研究所, 北京 100050

摘要:

目的: 药物透过血脑屏障是药代动力学的重要过程, H₂受体拮抗剂是作用于神经外周的抗溃疡药物, 为避免该类药... 方法和结果: 选择了不依赖于实验参数的比较分子力场分析(CoMFA)方法和最近发展的本征值(EVA)方法, 建立了有关的三维药代动力学性质(3D-QSPR)模型。CoMFA模型的统计参数为: 交叉验证系数 $r^2_{cv}=0.625$, 相关系数 $r^2=0.893$, $F_{3,17}=47.270$, 标准偏差 $SE=0.254$; EVA模型的统计参数为: 交叉验证系数 $r^2_{cv}=0.697$, 相关系数 $r^2=0.922$, $F_{3,17}=67.766$, 标准偏差 $SE=0.203$ 。结论: 两种方法都能建立三维定量构效模型, EVA模型有更高的预测能力。

关键词: 血脑屏障; 3D-QSPR; H₂受体拮抗剂; CoMFA方法; EVA方法

3D-QSPR OF BLOOD BRAIN BARRIER TRANSPORT FOR H₂ RECEPTOR ANTAGONIST BY USING COMFA AND EVA METHOD

Zhu Qiqing ; Qu Lingbo ; Lei Xinshengand Guo Zongru

Abstract:

AIM: To built the model of blood brain barrier transport of 21 H₂ receptor antagonists.METHODS AND RESULTS: The model was built by CoMFA (comparative molecular field analysis) and EVA (eigen values) method. Both CoMFA and EVA gave significant relationships with high cross-validation correlation. The CoMFA model yielded a cross-validation 0.625 of r^2_{cv} , conventional r^2 of 0.893, $F_{3,17}=47.270$, and SE (Standard Error)=0.254; the statistical parameters for the EVA model are 0.697 of r^2_{cv} , conventional r^2 of 0.922, $F_{3,17}=67.766$, SE (Standard Error)=0.203. CONCLUSION: The results showed that EVA model and CoMFA model have good predictive ability, but the EVA model showed higher predictive ability than the CoMFA model because it can exactly describe all properties of the molecule and is independent of the molecular alignment rule.

Keywords: 3D-QSPR H₂ receptor antagonist CoMFA EVA blood brain barrier

收稿日期 1998-10-05 修回日期 网络版发布日期

DOI:

基金项目:

通讯作者: 郭宗儒

作者简介:

参考文献:

本刊中的类似文章

文章评论 (请注意: 本站实行文责自负, 请不要发表与学术无关的内容! 评论内容不代表本站观点.)

扩展功能

本文信息

- Supporting info
- PDF(451KB)
- [HTML全文]
- 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
- 文章反馈
- 浏览反馈信息

本文关键词相关文章

- 血脑屏障; 3D-QSPR; H₂受体拮抗剂; CoMFA方法; EVA方法

本文作者相关文章

- 朱七庆
- 屈凌波
- 雷新胜
- 郭宗儒

PubMed

- Article by
- Article by
- Article by
- Article by

反 馈 人	<input type="text"/>	邮箱地址	<input type="text"/>
反			

馈
标
题

验证码

5966