

研究论文

**$\beta$** 分泌酶抑制剂的药效团模型研究

黄文海 胡纯琦 廖勇 盛荣 胡永洲\*

(浙江大学巴黎高等师范学院药物化学联合实验室 浙江大学药学院 杭州 310058)

收稿日期 2007-11-20 修回日期 2008-3-24 网络版发布日期 2008-8-28 接受日期 2008-4-21

摘要

选择活性跨越0.002至25  $\mu\text{mol}\cdot\text{L}^{-1}$ 的4类共25个 $\beta$ 分泌酶抑制剂作为训练集,使用Catalyst软件包构建出药效团模型,并通过对药效团的有效性分析,筛选得到的最佳模型( $\text{correlCorrel}=0.969$ ,  $\text{Config}=16.32$ ,  $\Delta\text{cost}=62.422$ )由一个环芳香性、一个疏水中心、一个正电荷中心和一个氢键供体组成.并用其它209个抑制剂组成测试集对模型进行验证,结果表明该模型显示出较强的预测能力,能够为进一步的数据库搜索,寻找新型的 $\beta$ 分泌酶抑制剂先导物提供依据.

关键词

[药效团模型](#)  [\$\beta\$ 分泌酶](#) [非肽类抑制剂](#)

分类号

DOI:

通讯作者:

胡永洲 [huyz@zju.edu.cn](mailto:huyz@zju.edu.cn)

作者个人主页:

黄文海 胡纯琦 廖勇 盛荣 胡永洲\*

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF](#)(340KB)

▶ [\[HTML全文\]](#)(0KB)

▶ [参考文献\[PDF\]](#)

▶ [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](#)

相关信息

▶ [本刊中 包含 “](#)

[药效团模型” 的相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

· [黄文海 胡纯琦 廖勇 盛荣 胡永洲\\*](#)