药学学报 1999, 34(8) 590-595 DOI: ISSN: CN:

论文

选择性环氧合酶-2抑制剂的三维定量构效研究

雷新胜;朱七庆;屈凌波;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：建立环氧合酶-2选择性抑制剂的三维构效关系，设计新型的环氧合酶-2抑制剂。方法和结果：通过44个抑制剂与环氧合酶-2的对接确定分子的叠合模式，利用比较分子力场分析方法建立了44个选择性环氧合酶-2抑制剂的三维定量构效模型。模型的交叉验证系数R_{CV}^2=0.709，传统相关系数R_{CV}^2＝0.911，$F_{5，38}$＝75.66，标准偏差SE＝0.242。结论：利用DOCK和CoMFA相结合的方法提供了分子设计的新途径。

关键词： 环氧合酶-2 选择性环氧合酶-2抑制剂 比较分子力场分析 对接

THREE DIMENSIONAL QUANTITATIVE STRUCTURE-ACTIVITY RELATIONSHIP OF SELECTIVE CYCLOOXYGENASE-2 INHIBITORS

Lei Xinsheng; Zhu Qiqing; Qu Lingbo and Guo Zongru

Abstract:

AIM: The discovery of cyclooxygenase-2(COX-2) provides a new target for designing nonsteroidal anti-inflammatory drugs(NSAIDs) with less side effects. A series of inhibitors were analyzed in order to disclose the relationship between activity and structure. METHODS AND RESULTS: Forty four selective COX-2 inhibitors were investigated by means of dock and comparative molecular field analysis(CoMFA). Based upon the active conformation extracted from the SC-558/COX-2 complex all inhibitors were docked into receptor and aligned. The model from dock-CoMFA showed higher ability to explain and predict the activity of selective COX-2 inhibitors, cross-validated R_{cv2}=0.709, non-cross-validated r^2=0.911, $F_{5,38}$=75.606, SE=0.242. CONCLUSION: The combination of dock-CoMFA offers an approach to design new molecule.

Keywords: cyclooxygenase-2, selective COS-2 inhibitors, comparative molecular field analysis, DOCK

收稿日期 1998-10-26 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

1．柏爱萍;郭宗儒;褚凤鸣;.含双叔丁基苯基杂环化合物的三维定量构效关系研究[J]. 药学学报, 2001,36(5): 347-350

2．陈美珺;梁统;周克元.原花青素对脂多糖诱导RAW264 7细胞COX-2酶活性、mRNA及蛋白表达的影响[J]. 药学学报, 2005,40(5): 406-409

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(1226KB)
[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
环氧合酶-2
选择性环氧合酶-2抑制剂
比较分子力场分析
对接
本文作者相关文章
雷新胜
朱七庆
屈凌波
郭宗儒
PubMed
Article by
Article by
Article by
Article by

反馈人		邮箱地址	
反馈标题		验证码	9873

Copyright 2008 by 药学学报