

论文

糖蛋白IIb/IIIa受体拮抗剂三维构效关系研究

张洪旺;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: 研究三维构效关系, 建立药效模型, 为设计新型糖蛋白IIb/IIIa受体拮抗剂提供指导。方法和结果: 利用比较分子力场方法, 建立了IIb/IIIa受体拮抗剂的三维定量构效模型。在比较分子力场分析中, 利用拮抗剂晶体结构为模板, 进行了多种分子叠合形式研究, 建立了具有良好预测能力的三维定量构效关系模型, 表征模型预测能力的交叉验证系数 $R_{CV}^2=0.834$, 传统相关系数 $R^2=0.988$, $F=323.63$, 标准偏差SE (Standard Error of Estimate)=0.135。结论: 所得模型解释了已有的构效关系, 系数等势图映射的受体性质与实验结果相一致, 可以指导新的拮抗剂设计。

关键词: IIb/IIIa 拮抗剂 三维构效关系

THREE DIMENSIONAL QUANTITATIVE STRUCTURE-ACTIVITY RELATIONSHIP OF GPIIb/IIIa ANTAGONISTS

Zhang Hongwang; Qu Lingbo and Guo Zongru

Abstract:

AIM: To disclose the relationship between activity and structure of a new class of non-peptide fibrinogen receptor antagonists. METHODS AND RESULTS: A series of 16 GPIIb/IIIa antagonists were investigated with the aim of developing a 3D-QSAR model using comparative molecular field analysis(CoMFA). The active conformation and the alignment of the whole molecule were extracted from the sibrifiban crystal structure. The model shows higher ability to explain and predict the activity of GPIIb/IIIa antagonists, and cross-validated $R_{ev}^2=0.834$, Non cross-validated $R^2=0.988$, $F=323.63$, SE(standard error of estimate)=0.135. CONCLUSION: The 3D-model is consistent with the experiments.

Keywords: 3D-QSAR GPIIb/IIIa antagonists

收稿日期 1999-03-23 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(137KB)
- [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

- IIb/IIIa 拮抗剂
- 三维构效关系

本文作者相关文章

- 张洪旺
- 屈凌波
- 郭宗儒

PubMed

- Article by
- Article by
- Article by

反馈人	<input type="text"/>	邮箱地址	<input type="text"/>
反馈标	<input type="text"/>	验证码	<input type="text" value="4810"/>

