

论文

5,6-二芳基-2,3-二氢-1-吡咯里嗪酮类化合物抗炎作用的三维构效关系研究

赵丽琴;张守芳;袁越;胡远东;张涛;李松;

1.沈阳药科大学有机合成研究室, 辽宁沈阳 110015; 2.军事医学科学院毒物药物研究所, 北京 100850

摘要:

目的研究5,6-二芳基-2,3-二氢-1-吡咯里嗪酮类化合物抗炎作用的三维构效关系,为进一步设计新结构类型化合物提供理论依据。方法和结果用计算机辅助药物设计专家系统(Apex-3D)软件模拟并构建药效基团模型和三维构效关系(3D-QSAR)方程。结论化合物的抗炎活性与分子总疏水性、空间体积和吡里酮环1位基团和两个次级作用部位的性质有关;增加吡里酮环1位基团n电子密度,降低分子总疏水性,及减弱6位苯环对位取代,都将有利于化合物的抗炎作用。

关键词: 2,3-二氢-1-吡咯里嗪酮; 计算机辅助药物设计专家系统; 三维构效关系

3D-QSAR OF ANTI INFLAMMATORY ACTIVITIES OF 5,6-DIARYL-2,3-DIHYDRO-1-PYRROLIZINONE DERIVATIVES

ZHAO Li-qin; Shou-fang; YUAN Yue; HU Yuan-dong; ZHANG Tao; LI Song

Abstract:

AIM To study the SARs of 5,6-diaryl-2,3-dihydro-1-pyrrolizinone derivatives to provide information for the design of new structural compounds. METHODS AND RESULTS Three dimensional quantitative structure-activity relationship (3D-QSAR) model was constructed by Apex-3D. CONCLUSION The antiinflammatory activities of 5,6-diaryl-pyrrolizinones were related to the global hydrophobicity and volume, the properties of the group at 1-position of pyrrolizinone ring and the two secondary sites; improved the n-electronic density of the group at 1-position of pyrrolizinone ring and lowered the global hydrophobicity and the volume of p-substituent of the phenyl ring at 6-position of pyrrolizinone contributed to the antiinflammatory activities of the title compounds.

Keywords: Apex-3D 3D-QSAR 2,3-dihydro-1-pyrrolizinone

收稿日期 2000-08-14 修回日期 网络版发布日期

DOI:

基金项目:

通讯作者:

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(148KB)
- [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

- 2,3-二氢-1-吡咯里嗪酮; 计算机辅助药物设计专家系统; 三维构效关系

本文作者相关文章

- 赵丽琴
- 张守芳
- 袁越
- 胡远东
- 张涛
- 李松

PubMed

- Article by
- Article by
- 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	<input type="text"/>	验证码	<input type="text" value="8576"/>