

论文

5,6-二芳基-2,3-二氢-1-吡咯里嗪酮类化合物与环氧化酶的分子对接研究

赵丽琴;胡远东;袁越;张涛;张守芳;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:

目的探讨5,6-二芳基-2,3-二氢-1-吡咯里嗪酮类化合物的作用机制.方法以化合物ZZ-122为例,应用分子对接方法模拟化合物与环氧化酶-1(COX-1)和环氧化酶-2(COX-2)的作用.结果从ZZ-122与COX-1和COX-2的结合模式,形成复合物的分子间相互作用能及相应原子间形成氢键的能力表明,ZZ-122易于与COX-2结合,而不易与COX-1结合.结论ZZ-122可能是一个COX-2选择性抑制剂,但尚需酶结合实验进一步验证.

关键词: 2,3-二氢-1-吡咯里嗪酮 分子对接 环氧化酶-1 环氧化酶-2

STUDIED ON DOCKING OF 5,6-DIARYL-2,3-DIHYDRO-1-PYRROLIZINONE DERIVATIVES WITH CYCLOOXYGENASE

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

Abstract:

AIM To theoretically explore the mechanism of action of 5,6-diaryl-2,3-dihydro-1-pyrrolizone derivatives. METHODS The interactions of the compound ZZ-122 with cyclooxygenase-1 (COX-1) and cyclooxygenase-2 (COX-2) were modeled by docking method. RESULTS According to the binding pattern, intermolecular energy and capacity to form H bond, it was easy for ZZ-122 to bind to COX-2 and not easy to COX-1. CONCLUSION Compound ZZ-122 may be a selective COX-2 inhibitor, which has to be confirmed by experiment.

Keywords: docking COX-1 COX-2 2,3-dihydro-1-pyrrolizone

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

- 赵丽琴;杨志;张守芳;赵丽琴;.5,6-二芳基-2,3-二氢-1-吡咯里嗪酮类化合物的合成及抗炎镇痛活性[J]. 药学报, 2001,36(4): 258-261
- 赵丽琴;张守芳;袁越;胡远东;张涛;李松;.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

扩展功能

本文信息

- Supporting info
- PDF(129KB)
- [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
- 分子对接
- 环氧化酶-1
- 环氧化酶-2

本文作者相关文章

- 赵丽琴
- 胡远东
- 袁越
- 张涛
- 张守芳
- 李松

PubMed

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

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.)

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"/> 0654