

论文

1-咪唑基苯并二氮杂类法呢基蛋白转移酶抑制剂的三维定量构效关系研究

万升标;易翔;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:

目的建立法呢基蛋白转移酶抑制剂的三维定量构效关系,设计高效法呢基蛋白转移酶抑制剂.方法和结果利用比较分子力场分析方法(CoMFA)建立了32个法呢基蛋白转移酶抑制剂的三维定量构效关系,模型的交叉验证相关系数  $R^2_{CV}=0.602$ ,非交叉验证相关系数  $R^2=0.958$ ,标准偏差  $SE=0.270$ ,  $F=124.5$ .结论此模型对设计和预测高活性结构类型的化合物有一定的可靠性.

关键词: 法呢基蛋白转移酶 1-咪唑基苯并二氮杂 比较分子力场分析(CoMFA)

THREE DIMENSIONAL QUANTITATIVE STRUCTURE-ACTIVITY RELATIONSHIP OF FARNESYL PROTEIN TRANSFERASE INHIBITORS

WAN Sheng-biao; YI Xiang; GUO Zong-ru

Abstract:

AIM To build a three dimensional structure model that correlates the biological activities and the structures of a series of farnesyl protein transferase (FPT) inhibitors exemplified by the compound of 2,3,4,5 tetrahydro-1-(1H-imidazol-4-ylmethyl)-4-(2-biphenylcarbonyl)-1H-1,4-benzodiazepine. METHODS AND RESULTS Thirty-two FPT inhibitors with two types of scaffold were analyzed. Active conformations of which were studied using system search, a 3D-QSAR model were constructed using the method of comparative molecular field analysis (CoMFA). The resulting of cross validated  $R^2_{CV}=0.602$ , non-cross-validated  $R^2=0.958$ ,  $SE=0.270$  and  $F=124.5$  indicate that the 3D-model possesses an ability to predict activities of new inhibitors. CONCLUSION The information of CoMFA model offers an approach to designing new FPT inhibitors.

Keywords: benzodiazepine comparative molecular field analysis (CoMFA) farnesyl protein transferase (FPT)

收稿日期 2000-11-06 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. 万升标;易翔;郭宗儒.苯并环庚并吡啶类法呢基蛋白转移酶抑制剂的三维定量构效关系的研究[J]. 药学报, 2002,37(4): 257-262

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(124KB)
- [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

- 法呢基蛋白转移酶
- 1-咪唑基苯并二氮杂
- 比较分子力场分析(CoMFA)

本文作者相关文章

- 万升标
- 易翔
- 郭宗儒

PubMed

- Article by
- Article by
- Article by

反馈人	<input type="text"/>	邮箱地址	<input type="text"/>
反			

