

论文

对氨基苯甲酸酯同系物透皮速率的分子轨道法研究

傅旭春;梁文权

浙江医科大学药理学系,杭州310006

摘要:

用半经验分子轨道法计算得到了13个对氨基苯甲酸酯类化合物的电子结构参数,并用逐步多元回归分析法导出了它们通过大鼠腹部皮肤的透皮稳态流率和渗透系数与电子结构参数之间的相关方程式。结果表明,透皮稳态流率和渗透系数均与亲电超离域度之和( $\Sigma SE$ )或净原子电荷绝对值之和( $\Sigma Q$ )具有较好的抛物线型相关性。 $\Sigma SE$ 和 $\Sigma Q$ 与正辛醇/水分分配系数或分子体积之间也存在很好的线性相关性。

关键词: 透皮吸收 透皮稳态流率 渗透系数 分子轨道法MNDO-PM3

STUDY ON PERCUTANEOUS RATE OF P-AMINO BENZOATES USING MOLECULAR ORBITAL METHOD

XC Fu and WQ Liang

Abstract:

The semiempirical self-consistent field molecular orbital calculation MNDO-PM3 method was utilized to obtain the electronic structural parameters of 13 p-aminobenzoates. Stepwise multiple regression analyses were then utilized to generate quantitative structure-activity relationships between the percutaneous fluxes or permeability coefficients and the electronic structural parameters. The results showed that both the percutaneous fluxes and permeability coefficients were well correlated parabolically with the electrophilic superdelocalizabilities summed over all atoms ( $\Sigma SE$ ) or the sum of the absolute values of the net atomic charges ( $\Sigma Q$ ). Significant correlations were observed between  $\Sigma SE$  or  $\Sigma Q$  and the octanol/water partition coefficients or the molecular volumes.

Keywords: Percutaneous flux Permeability coefficient Molecular orbital calculation MNDO-PM3 method Percutaneous absorption

收稿日期 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

1. 王来友; Jelle; Millet; 黄芳芳; 杨得坡. 花椒毒素在人体皮肤及角质层中的渗透动力学探讨[J]. 药学报, 2006, 41(9): 878-881
2. 崔东贤; 杉林坚次; 森本雍宪; 李凤龙. 中药冰片—水杨酸低共熔物透皮吸收研究[J]. 药学报, 1989, 24(7): 556-558
3. 平其能; 刘国杰. 精油对5-氟脲嘧啶渗透大鼠皮肤的促进作用[J]. 药学报, 1996, 31(3): 214-221
4. 程宇慧; 杉林坚次; 森本雍宪; 廖工铁; 侯世祥. 局部麻醉药利多卡因透皮吸收的研究[J]. 药学报, 1995, 30(8): 615-620
5. 毛晓明; 梁秉文; 饶亚萍; 方世珍; 李群. 在脉冲电流作用下胰岛素经皮吸收对糖尿病大鼠血糖的影响[J]. 药学报, 1995, 30(12): 881-885
6. 武国杰; 梁颖彬; 王莉芳; 马小亚; 邢建峰. 硝苯啶的光解分析法及其在透皮吸收研究中的应用[J]. 药学报, 1993, 28(8): 626-628

扩展功能

本文信息

- ▶ Supporting info
- ▶ PDF (185KB)
- ▶ [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

- ▶ 透皮吸收
- ▶ 透皮稳态流率
- ▶ 渗透系数
- ▶ 分子轨道法MNDO-PM3

本文作者相关文章

- ▶ 傅旭春
- ▶ 梁文权

PubMed

- ▶ Article by
- ▶ Article by

7. 梁文权;林武.药物分子体积和油水分配系数与经应吸收的关系[J]. 药学学报, 1992,27(9): 684-689
8. 王莉芳;马小亚;梁颖彬;朱周才.硝普钠的光解分析法及其在透皮吸收研究中的应用[J]. 药学学报, 1992,27(8): 624-628
9. 徐益众;徐惠南.噻吗洛尔的透皮特性及影响其透皮吸收的因素[J]. 药学学报, 1992,27(6): 467-471
10. 杨丽;郑俊民.应用导数光谱法考察苯味洛尔溶液体外经皮渗透性[J]. 药学学报, 1990,25(12): 916-919
11. 赵凯存;宣文漪;赵一;宋振玉.青蒿琥酯皮肤擦剂在小鼠和兔体内的药代动力学研究[J]. 药学学报, 1989,24(11): 813-816
12. 张援;许东晖;马争;陈颖;赵君军;许实波.格列美脲凝胶骨架控释贴剂的制备及体内外评价[J]. 药学学报, 2004,39(8): 640-644

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 style="width: 95%;" type="text"/>	邮箱地址	<input style="width: 95%;" type="text"/>
反 馈 标 题	<input style="width: 95%;" type="text"/>	验证码	<input style="width: 60px;" type="text" value="1348"/>