

论文

用分子轨道法对倍半萜类抗癌剂构效关系的研究

王玉珠;周淑兰

沈阳药学院制药系合成药物研究室

摘要:

本文列举35种倍半萜类抗癌剂的结构和活性,从中归纳出有强抗癌活性的必要条件是分子中必须具有含共轭π键的活性基团。采用CNDO分子轨道法模拟地计算了这些活性基团的E<sub>LUMO</sub>,发现其E<sub>LUMO</sub>愈低,其母体的抗癌活性就愈高,并且这些E<sub>LUMO</sub>与RNA、DNA分子中碱基的E<sub>LUMO</sub>的差值较小。作者据此提出了倍半萜类抗癌剂的两个亲电活性基团分别与RNA或DNA的双股核苷酸链上的碱基发生电荷转移络合的抗癌机理。

关键词: 倍半萜 抗癌剂 分子轨道

STRUCTURE-ACTIVITY RELATIONSHIPS OF SESQUITERPENOID ANTITUMOR AGENTS USING MOLECULAR ORBITAL METHOD

WANG YU-zhu and ZHOU Shu-lan

Abstract:

The structures and activities of 35 sesquiterpenoid antitumor agents are discussed, and found that each compound must have an active group with a conjugated π-bond. The values of their E<sub>LUMO</sub> are imitatively calculated using CNDO method. It is evident that the smaller the value of the E<sub>LUMO</sub>, the more active the original antitumor compounds, The differences between the values Of E<sub>LUMO</sub> of the bases in DNA (and in RNA) and those of E<sub>LUMO</sub> of the imitative sesquiterpenoids are so small that the charge can be transferred between them. It is postulated that this charge transfer complexing between the two electrophilic groups in sesquiterpenoids and the bases in double helix of DNA or/and RNA may contribute to the antitumor mechanism of this class of compounds.

Keywords: Antitumor agent Molecular orbital Sesquiterpenoid

收稿日期 1981-11-17 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. 王世盛;张金梅;郭修晗;宋其玲;赵伟杰.温郁金中的新桉叶烷型倍半萜内酯[J]. 药学报, 2007,42(10): 1062-1065
2. 梁侨丽;闵知大.地胆草倍半萜内酯化合物的结构修饰[J]. 药学报, 2007,42(11): 1159-1161
3. 王丽瑶;张勉;张朝凤;王峥涛.黄丝郁金中的生物碱和倍半萜类成分[J]. 药学报, 2008,43(7): 724-727
4. 赵雪梅;叶兴乾;朱大元.常山胡柚皮中的一个新化合物[J]. 药学报, 2008,43(12): 1208-1210
5. 余竞光;丛浦珠;林级田;方洪钜.国产檀香油化学成分和五个新化合物的初步结构研究[J]. 药学报, 1988,23(11): 868-872
6. 陈泽乃;徐佩娟.野菊花内酯的结构鉴定[J]. 药学报, 1987,22(1): 67-69
7. 于德泉;谢凤指.野菊花化学成分的研究[J]. 药学报, 1987,22(11): 837-840
8. 张玫;何林兴.变色马兜铃中银袋内酯乙、丙的结构测定[J]. 药学报, 1986,21(4): 273-278

扩展功能

本文信息

- ▶ Supporting info
- ▶ PDF(337KB)
- ▶ [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

- ▶ 倍半萜
- ▶ 抗癌剂
- ▶ 分子轨道

本文作者相关文章

- ▶ 王玉珠
- ▶ 周淑兰

PubMed

- ▶ Article by
- ▶ Article by

9. 杨峻山;陈玉武.国产沉香化学成分的研究 II.白木香醇和去氢白木香醇的分离和结构[J]. 药学学报, 1986,21(7): 516-520
10. 王惠康;林章代;何侃;万树文.新疆雪莲化学成分的研究[J]. 药学学报, 1986,21(9): 680-682
11. 韦宏;曾凡健;陆敏仪;唐人九.马桑根的化学成分研究[J]. 药学学报, 1998,33(9): 688-692
12. 林佳;郝小江;梁光义.毛果含笑的化学成分[J]. 药学学报, 1999,34(3): 203-206
13. 赵爱华;彭小燕;唐传劲;张荣平.芫菁还阳参中倍半萜类成分的分离和鉴定[J]. 药学学报, 2000,35(6): 442-444
14. 林绥;李援朝;樱井信子;林建峰;金静君;.雷公藤倍半萜生物碱的研究[J]. 药学学报, 2001,36(2): 116-119
15. 吴少华;罗晓东;马云保;郝小江;吴大刚.一支箭中抗胃溃疡的倍半萜内酯苷[J]. 药学学报, 2002,37(1): 33-36
16. 廖志新;王明奎;彭树林;陈耀祖;丁立生.菱叶紫菊的化学成分[J]. 药学学报, 2002,37(1): 37-40
17. 林绥;李援朝;樱井信子;曹剑虹;邓思珊;夏志林;谢狄霖.雷公藤榕碱的结构与分离[J]. 药学学报, 2002,37(2): 128-130
18. 张琪;王勤;苗瑞东;王芳.盘花垂头菊中两种新型倍半萜类化合物抑制人肝癌SMMC-7721细胞生长[J]. 药学学报, 2002,37(12): 993-995
19. 檀爱民;何红平;杨虹;张勉;王峥涛;郝小江.网脉橐吾的倍半萜类成分网脉橐吾的倍半萜类成分[J]. 药学学报, 2003,38(12): 924-926
20. 杨峻山;王玉兰;苏亚伦;贺存恒;郑启泰;杨晶.国产沉香化学成分的研究——III.异白木香醇的结构测定和低沸点成分的分离与鉴定[J]. 药学学报, 1989,24(4): 264-268
21. 林绥;李援朝;樱井信子;郑幼兰;邓福孝.雷公藤倍半萜生物碱的分离与结构[J]. 药学学报, 1995,30(7): 513-516
22. 陈宏明;李树春;王银叶;毛建民;蔡孟深;贾忠建.呋喃型倍半萜半乳糖碳苷的合成与药理活性[J]. 药学学报, 1997,32(10): 750-754
23. 王明安;刘军;陈馥衡.刺南蛇藤倍半萜的研究[J]. 药学学报, 1997,32(5): 368-372
24. 林绥;樱井信子;鄞幼兰;李援朝.免疫抑制成分异雷公藤春碱的分离与结构[J]. 药学学报, 1994,29(8): 599-602
25. 余竞光;丛浦珠;林级田;张友吉;洪少良;涂光忠.国产檀香中 $\alpha$ -反式香柠檬烯醇化学结构研究[J]. 药学学报, 1993,28(11): 840-844
26. 高炬;岳德超;程克棣;王树春;郁开北;郑启泰;杨峻山.榆耳发酵液中新倍半萜——榆耳三醇的结构[J]. 药学学报, 1992,27(1): 33-36
27. 张玖;何林兴;薛慧中;冯锐;濮全龙.变色马兜铃中银袋内酯甲的结构测定[J]. 药学学报, 1991,26(11): 846-851
28. 徐广顺;赵文;吴丹;于德泉;贺存恒;杨晶晶;孙放.异一枝蒿酮酸的结构[J]. 药学学报, 1991,26(7): 505-509
29. 杨峻山;苏亚伦;王玉兰;冯孝章;于德泉;梁晓天;贺存恒;郑启泰;杨晶晶;杨晶.蜜环菌菌丝体化学成分的研究——VI.蜜环菌癸素(*armillaripin*)的分离与结构[J]. 药学学报, 1990,25(5): 353-356
30. 薛慧中;张玖;何林兴;贺存恒;郑启泰;冯锐.银袋内酯丁的结构[J]. 药学学报, 1989,24(12): 917-922
31. 杨峻山;苏亚伦;王玉兰;冯孝章;于德泉;梁晓天.蜜环菌菌丝体化学成分的研究——V.蜜环菌辛素和蜜环菌壬素的分离与鉴定[J]. 药学学报, 1990,25(1): 24-28
32. 姜达衢;濮全龙;黄平;黄筱美;何玉珍;贺存恒;郑启泰.桂莪术化学成分的研究[J]. 药学学报, 1989,24(5): 357-359
33. 徐广顺;陈希元;于德泉.新疆一枝蒿新倍半萜成分——一枝蒿酮酸的结构[J]. 药学学报, 1988,23(2): 122-125
34. 任玉琳;周亚伟;叶蕴华.莴苣属植物化学成分和生物活性的研究[J]. 药学学报, 2004,39(11): 954-960
35. 李剑军;张东明;罗永明.宽叶金粟兰化学成分的研究[J]. 药学学报, 2005,40(6): 525-528
36. 糜竞芳;沈春镒.用旋光谱和圆二色谱研究青蒿素降解产物失碳倍半萜内酯的立体化学[J]. 药学学报, 1984,19(3): 184-189
37. 杨峻山;陈玉武.国产沉香化学成分的研究——I.白木香酸和白木香醛的分离和结构测定[J]. 药学学报, 1983,18(3): 191-198
38. 余竞光;陈毓亨;方洪钜;陈若芸.我国姜科药用植物研究——IV.姜三七醌(*Stahlianthusone*)的化学结构[J]. 药学学报, 1983,18(11): 839-842

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	<input type="text"/>	验证码	<input type="text" value="2952"/>

