

论文

氢醌类化合物抗菌活性的QSAR研究

孙恒庆;陈钟瑛;徐国英;徐丽英

华东化工学院,上海

摘要:

本文用Topliss,Free-Wilson和Hansch方法对氢醌类化合物的抗菌活性进行了QSAR研究。取代氢醌的抗菌活性可能是通过药物与受体间的电子转移所生成的电荷转移复合物而实现的。在Hansch分析中,应用了表征药物与受体间化学反应性的量子化学参数LEMO。三种方法配合取得了一致的良好结果。

关键词: 构效关系 氢醌类 抗菌活性 HMO方法

THE QUANTITATIVE STRUCTURE-ACTIVITY RELATIONSHIP OF THE ANTI-BIOTIC PROPERTIES OF A SERIES OF HYDROQUINONE

SUN Heng-qing; CHEN Zhong-ying; XU Guo-ying and XU Li-ying

Abstract:

The antibiotic properties of a series of hydroquinones were examined in an effort to study the quantitative structure activity relationship with the application of Topliss, Hansch and Free-Wilson methods. It seems likely that the pharmacological activity of the substituted hydroquinones, is realized by the charge transfer complex which is formed by the transfer of electrons from receptor site to the specific hydroquinone. In Hansch analysis, the parameter LEMO was calculated by molecular orbital technique and a better correlation was found in combination with other parameters. The experimental values of lg(1/C) agree fairly with the values calculated by both Hansch and Free-Wilson equations.

Keywords: Antibiotic properties Hydroquinones HMO technique. Structure-activity relationship

收稿日期 1980-12-02 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. 全建波;张生万;成素丽;李改仙. 三维氨基酸结构描述子矢量SVRDF及其在肽QSAR中的应用[J]. 药学报, 2007,42(1): 40-46
2. 马悦颖;尚明英;李沧海;霍海如;蔡少青;姜廷良. 桂枝汤有效成分丙烯酸类化合物干预IL-1 β 刺激小鼠脑微血管内皮细胞释放PGE₂的构效关系[J]. 药学报, 2007,42(7): 798-802
3. 韩香;王德心. 多肽调控因子AcSDKP的生物活性及构效关系研究进展[J]. 药学报, 2007,42(8): 810-816
4. 邵律成;盛春泉;张万年. 新结构类型抗真菌先导化合物的研究进展[J]. 药学报, 2007,42(11): 1129-1136
5. 魏静;于文全;高清志. A_{2B}型腺苷受体拮抗剂的研究进展[J]. 药学报, 2008,43(3): 241-246
6. 李波;朱维良2;陈凯先. 小檗碱及其衍生物的研究进展[J]. 药学报, 2008,43(8): 773-787
7. 李建康;和凡;毕惠端;左中;刘柏东;罗海彬;黄民. 黄酮类化合物对细胞色素P450 CYP1A2的抑制作用及其构效关系研究[J]. 药学报, 2008,43(12): 1198-1204
8. 方肇霞;李仁利;钱毅;梁惠玲. 5-取代苄基-2,4-二氨基嘧啶对大肠杆菌(1515)抑制作用定量构效关系的研究[J]. 药学报, 1987,22(1): 23-27
9. 刘云;张均田;杨靖华. 十二种苄基衍生物药理作用的比较[J]. 药学报, 1987,22(10): 725-729
10. 李仁利;王书玉. 桂皮酰胺类化合物抗惊作用定量构效关系的研究[J]. 药学报, 1986,21(8): 580-585
11. 曲筠;唐雯霞;戴安邦. 铂配合物的抗癌活性与其结构间的关系[J]. 药学报, 1986,21(8): 586-591
12. 李仁利;方肇霞. 二氢叶酸还原酶抑制剂:5-取代苄基-2,4-二氨基嘧啶类化合物选择性作用的研究[J]. 药学报, 1986,21(10): 753-760
13. 籍秀娟;张福荣. 靛玉红类化合物的抗肿瘤作用及构效关系的研究[J]. 药学报, 1985,20(2): 137-139
14. 翁尊尧;张广荣. 恩其明(AT-1840)开环类似物的合成和抗癌作用 1.通过光化反应合成取代-2-羟基-菲啶溴烷季铵盐[J]. 药学报, 1984,19(1): 28-34
15. 黄光燕;郭积玉;梁晓天. 紫杉烷类化合物 SINENXAN A 的结构修饰及其衍生物的构效关系研究[J]. 药学报, 1998,33(8): 576-586
16. 李金华;梁念慈;莫丽儿;张悦;何承伟. 半边旗5种成分体外细胞毒性比较及构效关系分析[J]. 药学报, 1998,33(9): 641-644
17. 何欣;林紫云;朱莉亚;付煊建. 苯酰胺类衍生物的合成及扩血管活性[J]. 药学报, 1998,33(9): 666-674
18. 王洪权;戚建军;孙兰英;余兰香;郭惠元. 吡啶酮类抗菌药物的研究XIV.7,8-双取代-1-环丙基-6-甲基-1,4-二氢-4-氧代喹啉-3-羧酸类化合物的合成与构效关系[J]. 药学报, 1998,33(9): 675-681
19. 刘瑞武;高由松;张守仁;梁晓天. 3,4-二氢-海南新碱类似物的合成及抗溃疡作用[J]. 药学报, 1998,33(9): 682-687
20. 丁平羽;李润涛;蔡孟深. 双芬太尼类化合物的合成及镇痛活性研究[J]. 药学报, 1998,33(10): 737-740
21. 吴楠;吕扬;郑启泰;方唯硕;高水莉;方超程;周同惠. 紫杉烷二萜类化合物精细立体结构研究[J]. 药学报, 1998,33(10): 759-763
22. 刘瑞武;尹大力;王东辉;李春;郭积玉;梁晓天. 新型14 β -侧链紫杉醇衍生物的合成及构效关系研究[J]. 药学报, 1998,33(12): 910-918
23. 郭颖;肖颖歆;郭宗儒;程桂芳. 依布罗啉衍生物对白三烯B₄生物合成抑制作用及其构效关系[J]. 药学报, 1999,34(9): 652-654
24. 李润涛;崔家玲;程铁明;蔡孟深. 二酰基双咪唑双季铵盐类衍生物的合成及镇痛活性[J]. 药学报, 1999,34(9): 666-668
25. 张洪旺;屈凌波;郭宗儒. 糖蛋白IIB/IIIA受体拮抗剂三维构效关系研究[J]. 药学报, 2000,35(1): 18-21
26. 王小芳;黄牛;屈凌波;杨光中. NMDA受体甘氨酸位点拮抗剂的三维构效关系研究[J]. 药学报, 2000,35(5): 347-352
27. 吴宁;任维华;霍笑风;陈强;王锐. 内吗啡肽及其类似物对心血管系统的作用[J]. 药学报, 2001,36(4): 241-245
28. 赵丽琴;张守芳;袁越;胡远东;张涛;李松. 5,6-二苄基-2,3-二氢-1-吡咯里啶酮类化合物抗炎作用的三维构效关系研究[J]. 药学报, 2001,36(5): 343-346
29. 苗及;凌仰之;朱娜;雷小平. P450_{17 α} 抑制剂—17位取代甾体化合物的三维定量构效关系[J]. 药学报, 2001,36(7): 507-510
30. 宋海峰;汤仲明. 反义药物作用中的“靶二级结构域”[J]. 药学报, 2001,36(8): 585-589

31. 陈建鸿;白东鲁. 作用于烟碱型胆碱受体激动剂的研究进展[J]. 药理学, 2002,37(4): 309-315
32. 费改顺;山丽梅;刘淑红;梁远军;刘克良;汪海. 新型肽类化合物对内皮素受体的拮抗作用及其心血管药理活性的评价[J]. 药理学, 2002,37(8): 593-597
33. 徐志防;魏孝义;谢海辉;杨仁洲. 番荔枝内酯类化合物对肝细胞耗氧呼吸的抑制作用及其构效关系[J]. 药理学, 2002,37(10): 818-820
34. 潘显道;方唯硕. 抗癌药秋水仙碱及其类似物构效关系研究进展[J]. 药理学, 2002,37(10): 821-827
35. 程卯生;闫冬;王千里;张莉;沈建民. 有抗疟活性的丙烷酰胺类化合物的合成和三维定量构效关系研究[J]. 药理学, 2003,38(7): 505-510
36. 潘显道;王存英. 天然抗肿瘤喜树碱衍生物的研究进展[J]. 药理学, 2003,38(9): 715-720
37. 郭忠武;屠世忠;李万亥;陈洁. 肌松药物巴氯芬类似物的合成及其构效关系的研究[J]. 药理学, 1990,25(1): 11-11
38. 王明亮;纪庆娥. 二吗啉类化合物的合成及其抑酶活性[J]. 药理学, 1991,26(2): 103-110
39. 陈晓盼;王玉龙;陈常英;商尔. 顺-3-甲基芬太尼的4-N-丙酰基结构类似物的合成与镇痛活性及构效关系的研究[J]. 药理学, 1992,27(7): 503-509
40. 陈佩林;彭司勋;杨祯祥. 缬(丙)-酪和缬-酪-酪肽类化合物的合成和生物活性[J]. 药理学, 1992,27(12): 895-902
41. 俞庆森;蔡国强;朱龙观. 喹诺酮类C-2位构效关系的分子力学和量子化学研究[J]. 药理学, 1994,29(8): 595-598
42. 何克勤;程桂芳;奚凤德;郭宗儒;朱秀媛. 查耳酮类化合物对过敏性慢反应物质拮抗作用的构效关系[J]. 药理学, 1996,31(11): 878-880
43. 张大志;周廷森;吴义杰;刘超美;麻铭川;冯向庭. 1-(1H-1,2,4-三唑-1-基)-2-(2,4-二氟苯基)-3-取代-2-丙醇的合成及抗真菌活性研究[J]. 药理学, 1997,32(12): 943-949
44. 庞素华;郭宗儒;梁晓天. 酪氨酸蛋白激酶抑制剂的合成及生物活性[J]. 药理学, 1997,32(7): 515-523
45. 丁平羽;于德泉. 新疆藜木保肝有效成分类似物的合成研究[J]. 药理学, 1996,31(11): 817-822
46. 黄晓龙;李兰敏;徐世平;付招娣;安兵. 抗癌及癌化学预防药物的研究: 3- α -酮醛香豆素衍生物的合成及其抗致突变性与结构间的关系[J]. 药理学, 1996,31(7): 509-516
47. 黄晓龙;徐世平;付招娣;安兵. 抗癌及癌化学预防药物的研究: 3-乙酰香豆素衍生物的合成及其抗致突变性与结构间的关系[J]. 药理学, 1996,31(6): 431-436
48. 李志良;胡芳;梁本熹;余虎;石乐明;李梦龙;酒井诚. 神经网络用于环丙胺类衍生物的结构关系研究[J]. 药理学, 1996,31(1): 38-42
49. 邓巧临;曹斌;来鲁华;唐有祺. 磷脂酶A₂抑制剂的三维构效关系研究[J]. 药理学, 1995,30(6): 428-434
50. 仇文升;沈怡;李五岭;吴艳芬;蔡松君;李心愿;汤丽霞;王丽佳;李仁利. 3-硝基-1,2,4-三唑类之氧细胞放射增敏剂的构效关系[J]. 药理学, 1994,29(10): 739-745
51. 傅旭春;刘志强;李士敏. 对氨基二苯醌类似物抑制细胞色素P-450的定量构效关系[J]. 药理学, 1994,29(8): 589-594
52. 许国友;彭司勋;华维一. 取代苄基/萘甲基异喹啉类及有关季铵衍生物的合成与生物活性[J]. 药理学, 1994,29(2): 95-106
53. 陈常英;连洪寿;李玉林;陈春华;孙跃光. 亮氨酸脑啡肽的电子结构及构效关系研究[J]. 药理学, 1993,28(11): 823-828
54. 全哲山;李仁利;凌仰之. 5-取代-1-正丁基-3-吡唑啉酮类化合物的合成及抗惊作用的构效关系[J]. 药理学, 1992,27(9): 711-716
55. 陈建新;郭惠元. 吡啶酮类抗菌药物的研究——X、1,7-双取代-6-氟-1,4-二氢-4-氧代喹啉-3-羧酸类化合物的合成与构效关系[J]. 药理学, 1991,26(10): 733-740
56. 张存瑜;胡树琛;周慧殊;段廷汉. 7-酰氨基-3-(1,2,3-三唑甲基)头孢菌素衍生物的合成及其抗菌活性[J]. 药理学, 1991,26(3): 175-182
57. 高建华;文广广;张其楷. 抗胆碱药3-(2-苯基-2-环戊基-2-羟基-乙氧基)奎宁环烷的立体化学和构效关系[J]. 药理学, 1990,25(12): 891-897
58. 雷小平;梁燕;凌仰之;李仁利;裴印权. 5-取代苄基-1-氢及1-正丙基吡唑啉酮-3化合物抗惊作用QASR的研究[J]. 药理学, 1990,25(9): 684-688
59. 穆永琪;郭惠元;张致平. 吡啶酮类抗菌药物的研究VIII. 1-对氟苯基-6-氟-1,4-二氢-4-氧-7-(1-哌嗪)喹啉-3-羧酸及其类似物的合成和构效关系[J]. 药理学, 1989,24(4): 255-259
60. 何虎明;翁尊尧. 抗癌新药石蒜内铵(AT-1840)构效关系研究[J]. 药理学, 1989,24(4): 302-304
61. 盛春泉;朱杰;张万年;宋云龙;张珉;季海涛;余建鑫;姚建忠;杨松;缪震元. 新型三唑类化合物的合成及抗真菌活性[J]. 药理学, 2004,39(12): 984-989
62. 丁俊杰;丁晓琴;赵立峰;陈冀胜. 新型三维氨基酸结构描述符的研究及其在多肽QSAR中的应用[J]. 药理学, 2005,40(4): 340-346
63. 杨忠顺;李英. 与青蒿素相关的1,2,4-三恶烷及臭氧化物的研究进展[J]. 药理学, 2005,40(12): 1057-1063
64. 杨再昌;杨小生;王伯初;孙黔云. 水杨酸及其类似物抑制 β -内酰胺酶的构效关系研究[J]. 药理学, 2006,41(3): 230-232
65. 全建波;梁桂兆;周鹏;张生万;曾晖;李美萍;李志良. 三维全息原子场作用矢量用于四氢-咪唑-苯二氮酮类抗艾滋病药物定量构效关系研究[J]. 药理学, 2006,41(7): 654-658
66. 钮心懿;任志鸿. 萜萜碱衍生物与M胆碱受体相互作用的构效关系[J]. 药理学, 1984,19(5): 326-332
67. 郭宗儒. 三唑类化合物对L.casei离体二氢叶酸还原酶活性和L.casei细胞生长抑制作用的定量相关关系[J]. 药理学, 1983,18(1): 33-38
68. 郭宗儒. 三唑类化合物对小鼠成淋巴细胞瘤离体二氢叶酸还原酶活性和对瘤细胞生长抑制作用的定量相关关系[J]. 药理学, 1983,18(2): 125-129
69. 王嘉松;郭宗儒. 药物的定量构效关系的方法学研究——改进的逐步回归算法[J]. 药理学, 1983,18(4): 256-260
70. 李福林;张其楷. 分子连接性在脂肪胺类神经节阻断剂定量构效关系中的应用[J]. 药理学, 1982,17(8): 592-596
71. 翁尊尧;王肇瀛;严晓明. 新抗肿瘤物质——恩其明(UNGEREMINE, AT-1840)及其有关化合物的合成和构效关系[J]. 药理学, 1982,17(10): 744-749
72. 吴国沛;白斌祥;冷宗康;顾旭初. 抗日本血吸虫病活性物质——溴乙酸酯类定量构效关系的研究[J]. 药理学, 1982,17(11): 821-826
73. 李玉琴;司宏宗;肖玉良;刘彩虹;夏成才;李珂;齐永秀. 基于启发式和基因表达式编程法预测磺胺类药物的pK_a值[J]. 药理学, 2009,44(5): 486-490
74. 赵重甲. 戴秋云. 芋螺镇痛多肽研究进展[J]. 药理学, 2009,44(6): 561-565
75. 胡立宏. 徐吉庆. 基于经典天然产物的药物发现研究[J]. 药理学, 2009,44(1): 11-18
76. 李雯. 周游. 刘宏民. 尤启冬. 小分子钠通道阻滞剂镇痛构效关系的研究进展[J]. 药理学, 2009,44(2): 101-108

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: 20%;" type="text"/> 3843
<div style="border: 1px solid #ccc; padding: 5px; min-height: 70px;"> <!-- This area is intentionally left blank to represent the content of the text area --> </div>			