

综述与编译

## 三维定量构效关系和同源分子模拟在细胞色素P450研究中的应用

李 恩综述 李 燕审校

(中国医学科学院/中国协和医科大学药物研究所, 北京 100050)

收稿日期 2004-4-20 修回日期 网络版发布日期 2009-11-25 接受日期

**摘要** 细胞色素P450(CYP450)是参与各种外源物和内源物代谢的重要酶系,研究该酶与底物或抑制剂的相互作用对于阐明药物作用机制及疾病预防、治疗具有重要意义。CYP450对药物代谢的选择性不仅与底物本身密切相关,还与酶活性位点血红蛋白中的特殊氨基酸残基排列分布对底物的特异性识别有关。在人CYP450的晶体结构未知的情况下,三维定量构效关系、药效团及同源分子模拟被认为是目前深入研究酶活性位点的有效工具。

**关键词** [细胞色素P450](#) [三维定量构效关系](#) [同源分子模拟](#) [药效团](#)

**分类号** [R914.5](#) [Q559+.9](#)

### 扩展功能

#### 本文信息

- ▶ [Supporting info](#)
- ▶ [PDF\(142KB\)](#)
- ▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)
- ▶ [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](#)
- ▶ [复制索引](#)
- ▶ [Email Alert](#)
- ▶ [文章反馈](#)
- ▶ [浏览反馈信息](#)

#### 相关信息

- ▶ [本刊中 包含“细胞色素P450”的相关文章](#)
- ▶ [本文作者相关文章](#)
- [李 恩综述 李 燕审校](#)

#### Abstract

#### Key words

DOI:

通讯作者