

当前位置: 科技频道首页 >> 新药研发 >> 药物分析与鉴定 >> 药物分子设计

请输入查询关键词

科技频道

搜索

药物分子设计

关键词: **抑制剂** **构效关系** **合成**

所属年份: 2001

成果类型: 基础理论

所处阶段:

成果体现形式: 论文

知识产权形式:

项目合作方式:

成果完成单位: 天津师范大学

成果摘要:

传统的药物开发方法是从具有生物活性的先导化合物展开合成、生物活性测定、筛选、优化,并以优化化合物为先导,重复以上过程多次后,得到有商用价值的药物,这是一个费事费力的漫长过程。随着分子生物学,分子药理学和生物化学的发展,以及计算化学和计算机图形技术的日渐成熟,特别是药物分子作用的靶蛋白晶体结构的测定,根据靶蛋白活性中心的三维结构的特点,主动地设计生物活性分子的研究方法--药物分子设计方法,不乏成功的实例。本课题除采用传统的化学合成、结构和表征外,利用计算机化学技术中的分子结构模拟技术、三维构效关系建模方法、蛋白质立体结构理论建模、药效团分析等方法及受体配体结合能计算等方法,对乙酰乳酸合成酶(ALS)、原卟啉原氧化酶、血管紧张素转化酶、光合系统II建立了蛋白理论模型,对其抑制剂作了较为深入细致的研究,构造了上述各类抑制剂与受体作用的可能的药效团模型,合成了具有较高抑制活性的先导化合物,可作为应用开发的基础,并以33篇刊登在国内外重要学术刊物上的研究论文,向国内外展现了研究工作所取得的成果。

成果完成人: 缪方明;王瑾玲;刘小兰;李维忠;孙命;李爱秀;周卫红;苏华庆

[完整信息](#)

行业资讯

- 中成药和保健食品添加枸橼酸...
- 药品快速检测技术及应用研究
- 藏基工具书《甘露本草明镜》编著
- 文山州医疗机构自拟处方制剂...
- 2005年版《中华人民共和国药...
- 当代XRD物理技术对晶体药物结...
- 当代XRD物理技术对晶体药品结...
- RY-A、RY-B热原测试仪
- JCAZ二型安瓿注射液异物自动...
- 青霉素类药物检测卡与药物检测器

成果交流

推荐成果

- [计算机辅助设计和药物化学的...](#) 04-17
- [高通量药物筛选技术体系研究...](#) 04-17
- [哥纳香醇甲的抗癌活性](#) 04-17
- [组合化学技术平台的建立及其应用](#) 04-17
- [维生素E的高效液相色谱分析法](#) 04-17
- [脱毒工程菌及其应用](#) 04-17
- [酯基于靶mRNA高级结构模拟与...](#) 04-17
- [生物技术药物临床前药效和安...](#) 04-17
- [类焦油药物的研究](#) 04-17

Google提供的广告