

论文

用定量构效关系分析进行酪氨酸激酶抑制剂的结构类型衍化

郭宗儒;后藤了;杨光中;寺田弘

中国医学科学院药物研究所,北京100050; *德岛大学药学部,德岛,日本

摘要:

用QSAR方法分析了取代的亚苄丙二腈类衍生物的定量构效关系,结果表明苯环上的两个或两个以上的羟基与侧链上可极化的共轭链的存在是酪氨酸激酶抑制剂的必要结构。与其它类型的抑制剂作构效分析,衍化出对这类酶有抑制作用的基本结构。

关键词: 酪氨酸激酶抑制剂 亚苄丙二腈化合物 QSAR 摩尔折射 基本结构衍化

THE LEAD GENERATION OF PROTEIN TYROSINE KINASE INHIBITORS BY QUANTITATIVE STRUCTURE-ACTIVITY RELATIONSHIP ANALYSIS

ZR Guo;S Goto;GZ Yang;H Terada

Abstract:

Analysis of the quantitative relationship between a series of substitutedbenzylidenemalononitriles and the inhibitory action on protein tyrosine Kinases were carried out using the Hansch- Fujita method. The results indicate that the presence of two or three hydroxy groups attached to a phenyl ring, which connects an extended (trans form) conjugated chain, is essential to the inhibition. Compared with the structure of other kinds of inhibitors, a presumable basic structure for inhibiting the enzyme was generated.

Keywords: S Goto GZ Yang H Terada ZR Guo

收稿日期 1991-02-19 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. 茹勇军;李海泓;李剑峰;沈敬山. 蛋白酪氨酸激酶信号转导途径与抗肿瘤药物[J]. 药学学报, 2008,43(4): 323-334

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.)

扩展功能

本文信息

- Supporting info
- PDF(176KB)
- [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

- 酪氨酸激酶抑制剂
- 亚苄丙二腈化合物
- QSAR
- 摩尔折射
- 基本结构衍化

本文作者相关文章

- 郭宗儒
- 后藤了
- 杨光中
- 寺田弘

PubMed

- Article by
- Article by
- Article by
- Article by

反馈人	<input type="text"/>	邮箱地址	<input type="text"/>
反馈标题	<input type="text"/>	验证码	<input type="text"/> 2203