

论文

三维氨基酸结构描述子矢量SVRDF及其在肽QSAR中的应用

全建波;张生万;成素丽;李改仙

1. 山西大学 化学化工学院, 山西 太原 030006; 2. 晋中学院 化学化工系, 山西 晋中 030600

摘要:

为了建立一种新型氨基酸结构描述子并用于多肽定量构效关系研究, 本研究从天然氨基酸150个radial distribution function (RDF)指数经主成分分析得出一种新3D氨基酸描述子-SVRDF(principal component scores vector of radial distribution function), 应用该描述子并通过偏最小二乘(PLS)对苦味二肽、催产素及促凝血酶原激酶抑制剂3个体系建立定量构效关系模型。对3个体系建模复相关系数(r^2_{cum})与交互检验复相关系数(Q^2_{cum})分别为0.766和0.724; 0.941和0.811; 0.996和0.919。研究表明, SVRDF描述子能够系统地表征肽与生物活性相关的结构信息, 有望成为多肽定量构效关系研究中一种有效的结构表征方法。

关键词: 氨基酸 肽 SVRDF描述子 定量构效关系 偏最小二乘

A new SVRDF 3D-descriptor of amino acids and its application to peptide quantitative structure activity relationship

TONG Jian-bo; ZHANG Sheng-wan; CHENG Su-li; LI Gai-xian

Abstract:

To establish a new amino acid structure descriptor that can be applied to polypeptide quantitative structure activity relationship (QSAR) studies, a new descriptor, SVRDF, was derived from a principal components analysis of a matrix of 150 radial distribution function index of amino acids. The scale was then applied in three panels of peptide QSAR that were molded by partial least squares regression. The obtained models with the correlation coefficients (r^2_{cum}), cross-validation correlation coefficients (Q^2_{cum}) were 0.766 and 0.724 for 48 bitter tasting dipeptides; 0.941 and 0.811 for 21 oxytocin analogues; 0.996 and 0.919 for 20 thromboplastin inhibitors. Satisfactory results showed that information related to biological activity can be systemically expressed by SVRDF scales, which may be an useful structural expression methodology for the study of peptides QSAR.

Keywords: peptide SVRDF quantitative structure activity relationship partial least squares amino acids

收稿日期 2006-04-27 修回日期 网络版发布日期

DOI:

基金项目:

通讯作者: 张生万

作者简介:

参考文献:

本刊中的类似文章

1. 杨英; 饶春明; 王威; 韩春梅; 王军志. 液质联用分析重组人白细胞介素-11的肽图[J]. 药学学报, 2006,41(8): 756-760
2. 范锋; 孙晓飞. 去甲斑蝥素-半乳糖衍生物的合成与抗癌活性[J]. 药学学报, 2008,43(2): 157-161
3. 傅晓钟; 江赛红; 杨玉社; 嵇汝运. 新型非环核苷磷酸L-氨基酸酯类化合物的设计、合成与抗乙型肝炎病毒活性[J]. 药学学报, 2008,43(5): 495-503
4. 余蓉; 张贵锋; 高玲; 苏志国; 吴梧桐. 液相色谱-串联质谱法研究重组水蛭素12肽与瑞替普酶融合蛋白(HV12p-rPA)

扩展功能

本文信息

- ▶ Supporting info
- ▶ PDF(165KB)
- ▶ [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

- ▶ 氨基酸
- ▶ 肽
- ▶ SVRDF描述子
- ▶ 定量构效关系
- ▶ 偏最小二乘

本文作者相关文章

- ▶ 全建波
- ▶ 张生万
- ▶ 成素丽
- ▶ 李改仙

PubMed

- ▶ Article by
- ▶ Article by
- ▶ Article by
- ▶ Article by

- 的一级结构[J]. 药学学报, 2008,43(7): 737-742
5. 相秉仁;安登魁;路铭;徐建平.22种氨基酸的纸层析溶剂系统最佳组合选取方法的研究[J]. 药学学报, 1985,20(7): 519-524
 6. 刘景根;李瑞;刘国卿;王金晞.蝙蝠葛苏林碱及异构体对PC12细胞缺血性损伤的保护作用[J]. 药学学报, 1998,33(3): 165-170
 7. 刘景根;李瑞;刘国卿;王金晞.(-)-S-R-蝙蝠葛苏林碱对谷氨酸引起的大鼠大脑皮质神经元损伤的保护作用[J]. 药学学报, 1998,33(3): 171-174
 8. 郑红;吴玉田;方慧生.褶合光谱法用于DNA样品中杂质的限量检查[J]. 药学学报, 2000,35(11): 847-849
 9. 韩俊;盛龙生;杨仲元;相秉仁;安登魁.重组L-天门冬酰胺酶II的液相色谱/电喷雾离子化质谱法分析[J]. 药学学报, 2001,36(1): 46-50
 10. 张士善;张丹参;朱桐君;陈醒言.冬虫夏草氨基酸成分的药理分析[J]. 药学学报, 1991,26(5): 326-330
 11. 裴林;纵艳艳;孙亚锋;张光毅.氯胺酮和硝苯吡啶对培养神经元谷氨酸兴奋毒性的保护作用[J]. 药学学报, 1996,31(11): 812-816
 12. 詹先成;吴晓晔;秦蓓;茅涵斌;唐晖.复方氨基酸胶囊的稳定性研究[J]. 药学学报, 1996,31(12): 955-957
 13. 钟三保;刘维勤;李仁利;凌仰之;李重华;涂光忠;马立斌;洪少良.三尖杉酯类生物碱的半合成及结构与抗肿瘤活性的关系[J]. 药学学报, 1994,29(1): 33-38
 14. 高志玲;饶尔昌.氨基酮类甲酰(乙酰)氨基酸及二肽衍生物的合成[J]. 药学学报, 1993,28(10): 744-757
 15. 田少雷;赵树伟;朱爱堂;方茵;李克庆.抗肿瘤药物研究 I: 去甲斑蝥素氨基酸衍生物的合成与抗癌活性[J]. 药学学报, 1993,28(11): 870-875
 16. 辛军;胡璧;李政;糜福顺;沈瑜.吡啶丙烯酰氨基酸衍生物的设计、合成及其对离体HeLa-S₃细胞的放射增敏作用[J]. 药学学报, 1993,28(2): 97-104
 17. 姜凤超;马卫东;程仕才. β -锆代- α -氨基酸衍生物的合成及抗肿瘤活性[J]. 药学学报, 1992,27(2): 150-152
 18. 吴庆夫;魏俊杰;徐景达.红参中多肽成分的分离和鉴定[J]. 药学学报, 1991,26(7): 499-504
 19. 龙康侯;蹇敦龙;简志刚.海洋环肽噻唑氨基酸片断(D-Val)Thz的合成[J]. 药学学报, 1988,23(4): 304-307
 20. 刘建平;马旭;朱家璧.评价软胶囊中明胶交联反应的相关指标间的相关性及影响因素[J]. 药学学报, 2005,40(3): 279-284
 21. 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]. 药学学报, 2005,40(4): 340-346
 22. 郑敏;郭莲军;徐旭林;胡还忠;宗贤刚.ZD7288抑制大鼠穿通纤维—海马CA3区通路的突触传递[J]. 药学学报, 2006,41(6): 565-571
 23. 王哲清;冯大为;张椿年.柔红酮和阿霉酮氨基酸酯的合成[J]. 药学学报, 1984,19(5): 349-356
 24. 罗治权.14种氨基酸纸层析系统的最佳选取[J]. 药学学报, 1984,19(8): 599-605
 25. 邹正国;谢毓元.几种有肿瘤定位作用的N-取代氨基二乙酸衍生物的合成[J]. 药学学报, 1984,19(8): 630-632

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 题	<input type="text"/>	验 证 码	<input type="text" value="8907"/>