

引用信息: Wang Bao-Lei; Ma Ning; Wang Jian-Guo; Ma Yi; Li Zheng-Ming; Li Yong-Hong. Acta Phys. -Chim. Sin., 2004, 20(06): 577-581 [王宝雷; 马宁; 王建国; 马翼; 李正名; 李永红. 物理化学学报, 2004, 20(06): 577-581]

[本期目录](#) | [下期目录](#) | [过刊浏览](#) | [高级检索](#)

[\[打印本页\]](#) [\[关闭\]](#)

## 新磺酰胺类化合物除草活性的3D-QSAR分析

王宝雷; 马宁; 王建国; 马翼; 李正名; 李永红

南开大学元素有机化学研究所, 元素有机化学国家重点实验室, 天津 300071

### 摘要:

用比较分子力场分析 (CoMFA) 方法和比较分子相似性指数分析 (CoMSIA) 方法对所合成的新磺酰胺类化合物的除草活性进行了较为系统的3D-QSAR分析. 两种方法所建立的模型对化合物的除草活性预测能力均较好, 所得三维等值线图对合成高活性的化合物能提供指导作用

关键词: 磺酰胺 三维定量构效关系(3D-QSAR) 比较分子力场分析(CoMFA) 比较分子相似性指数分析(CoMSIA)

收稿日期 2003-12-03 修回日期 2004-01-12 网络版发布日期 2004-06-15

通讯作者: 李正名 Email: lzm518@eyou.com

### 本刊中的类似文章

1. 孙红梅; 谢前; 谢桂英; 周家驹; 许志宏; 李正名; 贾国锋; 王玲秀. 磺酰胺类除草剂的三维药效团模型[J]. 物理化学学报, 1995, 11(09): 773-776
2. 周家驹; 许志宏; 严新建; 孙敦明; 曹凌霄; 王红. 分子二维结构信息数值化的结构框架模型法及其应用[J]. 物理化学学报, 1993, 9(01): 41-49

Copyright © 物理化学学报

扩展功能

本文信息

[PDF\(1480KB\)](#)

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

▶ [磺酰胺](#)

▶ [三维定量构效关系\(3D-QSAR\)](#)

▶ [比较分子力场分析\(CoMFA\)](#)

▶ [比较分子相似性指数分析\(CoMSIA\)](#)

本文作者相关文章

▶ [王宝雷](#)

▶ [马宁](#)

▶ [王建国](#)

▶ [马翼](#)

▶ [李正名](#)

▶ [李永红](#)