

GABA受体抑制剂的柔性原子受体模型研究

沈斌; 陆忠华; 迟学斌; 吕海峰; 任天瑞

中国科学院计算机网络信息中心, 中国科学院过程工程研究所, 北京 100080

摘要:

利用Flarm软件为GABA受体抑制剂建立了其抑制家蝇和大鼠GABA受体的柔性原子受体模型, 很好地模拟了两种受体与药物分子结合的情况, 具有较好的预测能力, 预测集的预测值与实验值的相关系数(r^2)分别达到0.923和0.733, 模型的结果与药效团模型有很大的一致性, 为揭示药物与两种受体作用的区别提供了依据.

关键词: 柔性原子受体模型(Flarm) GABA受体 定量构效关系(QSAR) 抑制剂

收稿日期 2004-11-06 修回日期 2004-12-31 网络版发布日期 2005-07-15

通讯作者: 沈斌 Email: shenbin@sccas.cn

本刊中的类似文章

1. 彭涛; 裴剑锋; 周家驹. 酪氨酸激酶抑制剂的三维定量构效关系研究[J]. 物理化学学报, 2003, 19(02): 163-166

扩展功能

本文信息

PDF(359KB)

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

▶ 柔性原子受体模型(Flarm)

▶ GABA受体

▶ 定量构效关系(QSAR)

▶ 抑制剂

本文作者相关文章

▶ 沈斌

▶ 陆忠华

▶ 迟学斌

▶ 吕海峰

▶ 任天瑞