

苯并噻酮衍生物的3D-QSAR分析

蒋玉仁; 秦伟

中南大学化学化工学院, 长沙 410083

摘要:

苯并噻酮衍生物是近年来发现的一类抗血小板聚集化合物, 在前人研究的基础上利用比较分子场分析(CoMFA)和比较分子相似性指数分析(CoMSIA)对23个苯并噻酮衍生物进行了三维定量构效关系(3D-QSAR)研究. 其中CoMFA模型交叉验证系数 $Q^2=0.703$, 回归系数 $R^2=0.994$, 计算值与实验值的平均方差 $SEE=0.053$, 统计方差比 $F=184.773$; CoMSIA模型 $Q^2=0.847$, $R^2=0.992$, $SEE=0.058$, $F=171.670$. 两种方法得到的模型都具有较好的预测能力. 结果表明, 标题化合物中8-位取代基R1静电效应起主要作用; 2-位取代基R2立体效应占主导作用, 但官能团大小要适中. 根据研究结果设计了六种活性较高的化合物.

关键词: 苯并噻酮衍生物 三维定量构效关系 比较分子力场分析 比较分子相似性指数分析

收稿日期 2008-05-19 修回日期 2008-06-08 网络版发布日期 2008-08-28

通讯作者: 蒋玉仁 Email: jiangyr@mail.csu.edu.cn

本刊中的类似文章

Copyright © 物理化学学报

扩展功能

本文信息

[PDF\(564KB\)](#)

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

▶ [苯并噻酮衍生物](#)

▶ [三维定量构效关系](#)

▶ [比较分子力场分析](#)

▶ [比较分子相似性指数分析](#)

本文作者相关文章

▶ [蒋玉仁](#)

▶ [秦伟](#)