

研究简报

p53-MDM2结合抑制剂药效团模型的构建

盛荣; 胡纯琦; 黄文海; 胡永洲

浙江大学-巴黎高等师范学院药物化学联合实验室, 浙江大学药学院, 杭州 310058

摘要:

采用Catalyst软件, 选择5类共24个p53-MDM2结合抑制剂作为训练集, 经计算机建模、构象优化, 由Catalyst系统构建出药效团模型, 并对药效团进行有效性分析, 结合已知的p53-MDM2结合抑制剂的结构信息, 筛选得到含有一个芳环中心、三个疏水中心和一个氢键受体的具有较好预测能力(Correl=0.941, Config=17.530, 吟cost=150.830)的药效团模型.

关键词: p53-MDM2结合抑制剂 药效团模型 Catalyst软件

收稿日期 2007-05-09 修回日期 2007-06-06 网络版发布日期 2007-08-06

通讯作者: 胡永洲 Email: huyz@zjuem.zju.edu.cn

本刊中的类似文章

扩展功能

本文信息

[PDF\(759KB\)](#)

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

- [▶ p53-MDM2结合抑制剂](#)
- [▶ 药效团模型](#)
- [▶ Catalyst软件](#)

本文作者相关文章

- [▶ 盛荣](#)
- [▶ 胡纯琦](#)
- [▶ 黄文海](#)
- [▶ 胡永洲](#)