

研究简报

基于药效团模型从中草药数据库中搜索gpIIb/IIIa受体抑制剂

李旭东; 徐筱杰; 胡娟

北京大学化学与分子工程学院, 北京 100871; 福建中医学院, 福州 350108

摘要:

选择20个3,4-二氢-1(1H)-异喹啉酮类gpIIb/IIIa受体抑制剂作为训练集, 利用Catalyst软件包建立了gpIIb/IIIa受体抑制剂三维药效团模型. 探讨了药效团作用模式. 并通过建立的可靠性最佳的药效团模型(线性回归系数 $r=0.7715$), 从中草药数据库中虚拟筛选了gpIIb/IIIa受体抑制剂, 通过实验活性测定得到了8个抑制ADP活化全血血小板聚集的IC₅₀从40到100 $\mu\text{mol}\cdot\text{L}^{-1}$ 的化合物, 进一步证明了所建药效团模型的有效性.

关键词: 药效团模型 gpIIb/IIIa 中草药数据库

收稿日期 2007-09-03 修回日期 2007-11-06 网络版发布日期 2007-12-04

通讯作者: 徐筱杰; 胡娟 Email: xiaojxu@pku.edu.cn; huj@fjtc.edu.cn

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. 刘海波; 王占黎; 乔颖欣; 周家驹. 黄酮类醛糖还原酶抑制剂的抑制机理研究[J]. 物理化学学报, 2007,23(07): 1059-1064
3. 孔韧; 徐雪梅; 陈慰祖; 王存新; 胡利明. 基于吡咯烷与正丁烷类衍生物CCR5拮抗剂的药效团模型构建[J]. 物理化学学报, 2007,23(09): 1325-1331
4. 盛荣; 胡纯琦; 黄文海; 胡永洲. p53-MDM2结合抑制剂药效团模型的构建[J]. 物理化学学报, 2007,23(11): 1815-1820
5. 陈曦; 刘心霞; 黄慧; 胡慧慧; 姜凤超. EGFR酪氨酸激酶抑制剂的药效团模型构建[J]. 物理化学学报, 2008,24(02): 281-288
6. 侯廷军; 吴增茹; 廖宁; 李正; 骆宏鹏; 汪家权; 徐筱杰. 丙型肝炎病毒抑制剂的三维药效团和构效关系[J]. 物理化学学报, 2000,16(03): 196-201
7. 缪方明; 苏华庆; 王瑾玲; 李爱秀. DISCO法构建ALS抑制剂与受体作用的药效团模型[J]. 物理化学学报, 2000,16(10): 926-931

扩展功能

本文信息

PDF(778KB)

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

▶ 药效团模型

▶ gpIIb/IIIa

▶ 中草药数据库

本文作者相关文章

▶ 李旭东

▶ 徐筱杰

▶ 胡娟