

研究论文

HMG-CoA还原酶抑制剂三维药效团的构建

鲍红娟; 张燕玲; 乔延江

北京中医药大学中药学院, 北京 100102

摘要:

以作用于鼠肝脏细胞的21个3-羟基-3-甲基戊二酰辅酶A(HMG-CoA)还原酶抑制剂(RI)为训练集, 训练集化合物具备结构多样性, 来源于相同药理模型, 活性值IC₅₀范围在0.3-8000 nmol·L⁻¹. 利用Catalyst 计算HMG-CoA还原酶抑制剂最优药效团由一个氢键受体, 一个氢键给体, 一个疏水基团和一个芳香环特征组成. 药效团模型Fixed cost值, Total cost值和Configuration cost值分别为88.75、111.5 和16.98. 训练集化合物活性计算值与实测值相关系数为0.8883, 偏差值为1.269, 交叉验证结果表明, 药效团模型具有较高的置信度, 对测试集化合物活性值的预测结果显示有较好的预测能力, 可用于数据库搜索发现新的具有该活性的化合物, 也可用于中药或天然产物药物的研究开发.

关键词: HMG-CoA还原酶抑制剂 三维药效团 数据库搜索

收稿日期 2007-07-19 修回日期 2007-11-22 网络版发布日期 2008-01-02

通讯作者: 乔延江 Email: yjqiao@263.net

本刊中的类似文章

扩展功能

本文信息

PDF(1196KB)

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

▶ HMG-CoA还原酶抑制剂

▶ 三维药效团

▶ 数据库搜索

本文作者相关文章

▶ 鲍红娟

▶ 张燕玲

▶ 乔延江