

研究论文

EGFR酪氨酸激酶抑制剂的药效团模型构建

陈曦; 刘心霞; 黄慧; 胡慧慧; 姜凤超

华中科技大学同济医学院药学院, 武汉 430030

摘要:

以80个作用方式相同, 分子结构特征不同的表皮生长因子受体酪氨酸激酶(EGFR TK)竞争性抑制剂为训练集, 利用计算机药物辅助软件Catalyst, 构建不同的药效团模型, 并结合酪氨酸激酶的作用位点等因素, 筛选出一个含有两个芳环中心, 一个疏水中心和一个阳离子基团的具有较好预测能力(RMS=0.438, Correl=0.908, Weight=1.52, Config=17.36)的药效团模型, 为设计和合成新型结构的EGFR TK抑制剂提供参考.

关键词: 抗肿瘤药物 计算机辅助药物设计 EGFR抑制剂 药效团模型

收稿日期 2007-07-23 修回日期 2007-11-02 网络版发布日期 2008-01-02

通讯作者: 姜凤超 Email: fengchao@mails.tjmu.edu.cn

本刊中的类似文章

扩展功能

本文信息

PDF(1391KB)

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

▶ 抗肿瘤药物

▶ 计算机辅助药物设计

▶ EGFR抑制剂

▶ 药效团模型

本文作者相关文章

▶ 陈曦

▶ 刘心霞

▶ 黄慧

▶ 胡慧慧

▶ 姜凤超