

以ALS为靶标的新型除草剂的分子设计、合成及生物活性研究IV: 1, 2, 4-三唑并[1, 5-a]嘧啶-2-磺酰胺的晶体结构、量子化学及构效关系研究

杨光富,刘华银,杨华铮,杨秀凤

南开大学;元素有机化学国家重点实验室;南开大学元素有机化学研究所

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

摘要 在测定了具有不同活性1, 2, 4-三唑并[1, 5-a]嘧啶-2-磺酰胺类除草剂的晶体结构基础上, 采用半经验AM1方法对十种标题化合物进行了量子化学计算,

从空间构象及电子结构的角度探讨了该类除草剂的构效关系。发现三唑并嘧啶环可能是这类除草剂主要的活性部位, 其空间取向及供电子能力直接影响化合物的除草活性。

关键词 [药理学](#) [生物活性](#) [晶体结构](#) [量子化学](#) [构效关系](#) [电子结构](#) [环状结构](#) [嘧啶胺 P](#) [活性部位](#) [酰胺类除草剂](#) [磺酰胺 P](#) [三唑胺 P](#) [AM1](#)

分类号 [TQ45](#) [O621](#)

Design, syntheses and biological activity of novel herbicides targeted ALSIV: Studies on the crystal structure, quantum chemistry and structure-activity relationship of 1, 2, 4-triazolo[1, 5-a]pyrimidine-2-sulfonamides compounds

YANG GUANGFU, LIU HUAYIN, YANG HUAZHENG, YANG XIUFENG

Abstract On the basis of determining the crystal structure of three kinds of the title compounds displaying different herbicidal activities, semi-empirical AM1 method was applied to study the electronic structure of herbicidal 1, 2, 4-triazolo[1, 5-a]pyrimidine-2-sulfonamides compounds. At the same time, the structure-activity relationships of this kind of herbicides were also discussed in view of conformation and electronic structure. The results indicate that 1, 2, 4-triazolo[1, 5-a] pyrimidinyl moiety might be an important active site, of which the potency of electric charge translocation has a great influence on the herbicidal activity of this kind of compounds.

Key words [PHARMACODYNAMICS](#) [BIOLOGICAL ACTIVITY](#) [CRYSTAL STRUCTURE](#) [QUANTUM CHEMISTRY](#) [STRUCTURE ACTIVITY RELATIONSHIP](#) [ELECTRONIC STRUCTURE](#) [RING STRUCTURE](#) [PYRIMIDINAMINE P](#) [ACTIVE SITE](#) [ACETAMIDE-GROUP HERBICIDES](#) [SULFAMIDE P](#) [AMINOTRIAZOLE P](#) [AM1](#)

DOI:

通讯作者

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF\(0KB\)](#)

▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)

▶ [参考文献](#)

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](#)

▶ [复制索引](#)

▶ [Email Alert](#)

▶ [文章反馈](#)

▶ [浏览反馈信息](#)

相关信息

▶ [本刊中包含“药理学”的相关文章](#)

▶ [本文作者相关文章](#)

- [杨光富](#)
- [刘华银](#)
- [杨华铮](#)
- [杨秀凤](#)