

研究论文

分子模拟技术研究17种磺胺类药物与抗体亲和力构效关系

王战辉 丁双阳 张素霞 沈建忠*

(中国农业大学动物医学院 国家兽药残留基准实验室 北京 100094)

收稿日期 2008-3-20 修回日期 2008-6-24 网络版发布日期 2008-12-14 接受日期 2008-8-14

摘要

应用量子力学AM1方法对17种磺胺类药物(Sulfonamides, SAs)进行分子构型优化,得到了SAs的最低能量结构,并计算了SAs分子的重要构型参数(键长、键角和两面角)、电性参数(R基团和重要原子的电量)和物化参数(水合能、Log P值等). 通过比较SAs各个分子理化性质的差异,讨论了SAs与4株磺胺二甲基嘧啶(Sulfamethazine, SM2)多克隆抗体之间的构效关系,结果显示水合能和Log P在SM2抗体-抗原(SAs)构效关系中发挥重要作用,分子的空间结构和电子特性的作用有限.

关键词

[磺胺类药物](#) [多克隆抗体](#) [分子模拟](#) [量子化学](#) [构效关系](#)

分类号

DOI:

通讯作者:

沈建忠 sjz@cau.edu.cn

作者个人主页:

王战辉 丁双阳 张素霞 沈建忠*

扩展功能

本文信息

- ▶ [Supporting info](#)
- ▶ [PDF\(324KB\)](#)
- ▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)
- ▶ [参考文献\[PDF\]](#)
- ▶ [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](#)
- ▶ [引用本文](#)
- ▶ [Email Alert](#)

相关信息

- ▶ [本刊中 包含 “](#)

[磺胺类药物” 的相关文章](#)

- ▶ [本文作者相关文章](#)

· [王战辉,丁双阳,张素霞,沈建忠](#)