

q~2引导构象选择CoMFA方法研究HIV-1RT抑制剂

曾宝珊,陈敏伯,董喜成,刘新泳

中国科学院上海有机化学研究所,上海(200032);山东大学药学院药物化学研究所,济南(250012)

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

摘要 对未知受体结构的药物设计其主导方法CoMFA来说,柔性目标分子的多种构象造成了问题的复杂性。本文介绍交叉验证参数 $R^2(q^2)$ 引导的构象选择CoMFA方法,选择化合物的最佳构象。将一组47个HIV-1 RT抑制剂进行有、无构象选择的CoMFA分析来作评价。根据化合物的活性、毒性、选择性指数(毒性/活性比)等实验数据得到的模型,其交叉验证参数 q^2 为0.7以上,非交叉验证的相应参数为0.94以上,最后,还经过试验集化合物验证该模型的预测能力,置信度 $(1-\alpha) > 0.99$ 。

关键词 [定量构效关系](#) [比较分子场分析](#) [构象](#)

分类号 [0621](#)

q~2 Guided Conformation Selection Approach of CoMFA for HIV-1 RT Inhibitors

Zeng Baoshan, Chen Minbo, Dong Xicheng, Liu Xinyong

Laboratory of Computer Chemistry, Shanghai Institute of Organic Chemistry, Chinese Academy of Sciences, Shanghai (200032); School of Pharmacology, Shandong University, Jinan (250012)

Abstract

Key words [QUANTITATIVE STRUCTURE ACTIVITY RELATIONSHIP](#) [CoMFA](#) [CONFORMATION](#)

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“定量构效关系”的相关文章](#)
- ▶ 本文作者相关文章

- [曾宝珊](#)
- [陈敏伯](#)
- [董喜成](#)
- [刘新泳](#)