

王甫洋,张学胜,刘辉.几种酚衍生物对青海弧菌Q67毒性的3D-QSAR研究[J].环境科学学报,2012,32(11):2884-2890

几种酚衍生物对青海弧菌Q67毒性的3D-QSAR研究 3D-QSAR study on the toxicities of phenol derivatives to *Vibrio-qinghaiensis* sp.-Q67

关键词: [酚衍生物](#) [三维度量构效关系\(3D-QSAR\)](#) [比较分子场分析\(CoMFA\)](#) [比较分子相似性指数分析\(CoMSIA\)](#)

基金项目: [国家自然科学基金资助项目\(No. 20977046\)](#)

作者 单位

王甫洋 南京大学金陵学院 化学与生命科学学院, 南京 210089

张学胜 南京大学环境学院 污染控制与资源化研究国家重点实验室, 南京 210046

刘辉 嘉兴学院 生物与化学工程学院, 嘉兴 314001

摘要: 测定了16种酚衍生物对青海弧菌(Q67)的半致死浓度 EC_{50} ($mol \cdot L^{-1}$), 通过比较分子力场分析方法(CoMFA)和比较分子相似性指数分析方法(CoMSIA), 对16种酚衍生物的毒性进行了三维度量结构-活性相关(3D-QSAR)研究, 建立了CoMFA和CoMSIA模型. 其中CoMFA模型交叉验证相关系数 $Q^2 = 0.703$, 非交叉验证相关系数 $R^2 = 0.983$, F 检验值 $F = 178.635$; CoMSIA模型交叉验证相关系数 $Q^2 = 0.588$, 非交叉验证相关系数 $R^2 = 0.946$, F 检验值 $F = 52.074$, 所建立的模型均有较强的稳定性和良好的预测能力. 通过分析比较CoMFA和CoMSIA的三维等势图, 全面直观地了解了酚衍生物的结构对致毒性的影响. 在酚类化合物毒性作用过程中, 化合物的氢键供受体特性因素起主要作用, 其次是取代基的电负性和疏水性特征.

Abstract: The inhibition toxicities of 16 phenol derivatives to *Vibrio-qinghaiensis* sp.-Q67 were determined. A systematic study of three-dimensional quantitative structure activity relationship (3D-QSAR) on these compounds with respect to their fungicidal activities against *Vibrio-qinghaiensis* sp.-Q67 was conducted through comparative molecular field analysis (CoMFA) and comparative molecular similarity index analysis (CoMSIA). The coefficients of cross-validation Q^2 and non cross-validation R^2 for CoMFA model were 0.703 and 0.983, respectively, for CoMSIA model were 0.588 and 0.946; and F for CoMFA and CoMSIA models were 178.635 and 52.074, respectively. The results indicated that the two models had strong stability and good predictability. The 3D contour maps suggested that the H-bonding donor and H-bonding acceptor factors have greater impact on toxicity function, followed by the electrostatic and hydrophobic factors.

Key words: [derivatives of phenol](#) [three-dimensional quantitative structure activity relationship\(3D-QSAR\)](#) [comparative molecular field analysis \(CoMFA\)](#) [comparative molecular similarity index analysis\(CoMSIA\)](#)

摘要点击次数: 138 全文下载次数: 116

[关闭](#)[下载PDF阅读器](#)

您是第1733955位访问者

主办单位: 中国科学院生态环境研究中心

单位地址: 北京市海淀区双清路18号 邮编: 100085

服务热线: 010-62941073 传真: 010-62941073 Email: hjkb@rcees.ac.cn

本系统由北京勤云科技发展有限公司设计