

[本期目录] [下期目录] [过刊浏览] [高级检索]

[打印本页] [关闭]

论文

烯丙胺类抗真菌药物比较分子力场分析(CoMFA)的研究

季海涛;张万年;周有骏;吕加国;李科;朱驹;刘宁

第二军医大学药学院,上海200433

摘要:

本实验采用“活性类似物法”确定了烯丙胺类抗真菌化合物的药效构象,采用比较分子力场分析法(CoMFA)拟合了48个烯丙胺类抗真菌化合物对6种常见致病真菌的3D-QSAR方程,并比较了2种不同叠合规则对模型的影响,最后,用5个新合成化合物对所拟合的抗石膏样毛癣菌、抗烟曲霉菌的CoMFA模型的预测能力进行了检验,得到比较满意的结果。

关键词: 烯丙胺类抗真菌化合物 3D-QSAR CoMFA 药效构象 叠合规则

COMPARATIVE MOLECULAR FIELD ANALYSIS(CoMFA) OF ALLYLAMINE ANTIMYCOTICS

HT Ji; WN Zhang; YJ Zhou; JG Lu; K Li; J Zhu and N Liu

Abstract:

Active analog approach has been applied to determine the pharmacophoric conformations of the allylamine antimycotics. Comparative molecular field analysis (CoMFA) has been used to establish 3D-QSAR of 48 allylamine antimycotics against six common human pathogenic fungi. Two different alignment rules were compared in the meantime. Five new synthetic compounds have been successfully employed to examine the predictive abilities of the CoMFA models against *Trichophyton mentagrophytes* and *Aspergillus fumigatus*.

Keywords: 3D-QSAR CoMFA Pharmacophoric conformation Alignment rule Allylamine antimycotics

收稿日期 1996-06-20 修回日期 网络版发布日期

DOI:

基金项目:

通讯作者: 季海涛

作者简介:

参考文献:

扩展功能

本文信息

► Supporting info

► PDF(905KB)

► [HTML全文]

► 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

► 文章反馈

► 浏览反馈信息

本文关键词相关文章

► 烯丙胺类抗真菌化合物

► 3D-QSAR

► CoMFA

► 药效构象

► 叠合规则

本文作者相关文章

► 季海涛

► 张万年

► 周有骏

► 吕加国

► 李科

► 朱驹

► 刘宁

PubMed

► Article by

参考文献:

1. 季海涛;张万年;周有骏;吕加国;朱驹;李科;陈卫平;刘宁.烯丙胺和苄胺类抗真菌药物比较分子力场分析(CoMFA)的研究[J].药学学报,1998,33(3): 188-193

文章评论 (请注意:本站实行文责自负,请不要发表与学术无关的内容!评论内容不代表本站观点.)

反馈人	<input type="text"/>	邮箱地址	<input type="text"/>
反馈标题	<input type="text"/>	验证码	<input type="text"/> 5832

Copyright 2008 by 药学学报