

几种改进的CoMFA方法比较研究血小板活化因子拮抗剂

聂晶,董喜成,潘家祜

复旦大学药学院.上海(200032);中国科学院上海有机化学研究所.上海 (200032)

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

摘要 由于传统的比较分子场分析(CoMFA)方法本身存在一些缺陷,使得分子的叠合规则以及叠合分子的空间取向和空间位置等因素对 q^2 的影响很大,因此相继提出了几种改进的CoMFA方法。为了优化CoMFA结果,应用传统的CoMFA方法和交叉验证的 R^2 引导的区域选择法(q^2 -GRS)、全取向搜索法(AOS)、全空间搜索法(APS)以及比较分子相似性指数(CoMSIA)等四种改进的CoMFA方法,对18个pinusolide类衍生物这类新发现的血小板活化因子(PAF)拮抗剂进行了比较研究。结果表明四种改进的CoMFA方法得到的 q^2 值均比传统CoMFA的高。 q^2 -GRS方法得到的 q^2 值有所提高,但综合结果并不理想,AOS与APS得到的 q^2 较为理想,而在CoMSIA中, q^2 几乎不受空间取向或空间位置的影响。同时我们引入基于样本的偏最小二乘法(SAMPLS)取代原AOS/APS程序中的传统PLS进行统计分析,明显提高了其运行速度。最后,根据 q^2 最高的CoMFA模型和CoMSIA模型设计了几个预测活性更高的pinusolide类似物。

关键词 [比较分子场分析](#) [血小板活化因子拮抗剂](#) [比较分子相似性指数分析](#)

分类号 [0621](#)

Comparison of Modified CoMFAs in Study of PAF Antagonist

Nie Jing,Dong Xicheng,Pan Jiahu

School of Pharmacy, Fudan University,Shanghai(200032);Key Laboratory of Computer Chemistry, Shanghai Institute of Organic Chemistry, Chinese Academy of Sciences,Shanghai(200032)

Abstract

Key words [CoMFA](#) [PAF](#) [CoMSIA](#)

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“比较分子场分析”的相关文章](#)
- ▶ 本文作者相关文章

- [聂晶](#)
- [董喜成](#)
- [潘家祜](#)