

### 1-环丙基-6-氟-7-取代喹诺酮抗HIV活性的定量构效关系

李江波,曹维良,林瑞森,俞庆森,张敬畅

北京化工大学理学院;浙江大学化学系,杭州(310027)

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

**摘要** 用量子化学AM1法对一系列1-环丙基-6-氟-7-取代-1,4-二氢-4-氧-喹啉-3-羧酸的定量构效关系进行了研究,结果表明该类化合物在对HIV的抑制过程中是一很好的电子给予体,给电子的部位主要是7-位哌嗪基末端氮原子,并进一步提出从抗C<sup>+</sup>和G<sup>-</sup>菌活性差的喹诺酮中有望筛选出好的抗HIV化合物。

**关键词** [哌嗪P](#) [喹诺酮](#) [定量构效关系](#) [艾滋病](#) [有机氟化合物](#) [量子化学](#)

分类号 [0641](#)

### QSAR of 1-cyclopropyl-6-fluoro-7-substituted-1,4-dihydro-4-oxoquinoline-3-carboxylic acids for anti-HIV activity

Li Jiangbo, Cao Weiliang, Lin Ruisen, Yu Qingsen, Zhang Jingchang

Zhejiang Univ, Dept Chem, Hangzhou(310027)

**Abstract** The quantitative structure-activity relationship (QSAR) of a series of 1-cyclopropyl-6-fluoro-7-substituted-1,4-dihydro-4-oxoquinoline-3-carboxylic acids was investigated in using quantum chemical AM1 method. The results show that most of these compounds are excellent electron donors, and the main site of the electron donor of the compounds is located at the terminal nitrogen N(3) atom of 7-C group. We further demonstrated that these electron-donating compounds are effective in inhibiting HIV virus. This may hold promise to screen out potential anti-HIV compounds from quinolones which traditionally show low antibacterial activities against G<sup>-</sup> and G<sup>+</sup>.

**Key words** [PIPERAZINE P](#) [QUINOLONE \(=CARBOSTYRIL\)](#) [QUANTITATIVE STRUCTURE ACTIVITY RELATIONSHIP](#) [AIDS](#) [ORGANO FLUORINE COMPOUNDS](#) [QUANTUM CHEMISTRY](#)

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“哌嗪P”的相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

- [李江波](#)
- [曹维良](#)
- [林瑞森](#)
- [俞庆森](#)
- [张敬畅](#)