

图书基本信息

书名：<<计算机辅助药物设计(下)-药物化学百科9>>

13位ISBN编号：9787030203571

10位ISBN编号：7030203577

出版时间：2007-10

出版时间：科学

作者：梅森

页数：853

版权说明：本站所提供下载的PDF图书仅提供预览和简介，请支持正版图书。

更多资源请访问：<http://www.tushu007.com>

## 内容概要

本书主要具有以下特色： 1. 几乎囊括了计算机辅助药物设计的各个领域（ADMET相关内容在丛书的第5卷），为读者全面了解该学科的历史、现状和发展趋势提供了丰富的素材和极大的便利。

2. 汇集了计算机辅助药物设计领域的最新研究成果，并且为本书撰稿的作者都是各自领域的一流科学家，他们的观点反映了学界当前对相关问题的最新的认识。

3. 特意收录不同专家对同一问题的不同观点，以及这些研究者对其采用或首选的特定方法的相关实用建议，这样有利于开阅读者的视野，并有利于帮助读者解决其在研究中遇到实际问题。

4. 在写作方面深入浅出，刚刚步入该领域的新手通过循序渐进地阅读本书，能比较快地进入计算机辅助药物设计研究领域。

作者简介

编者：(丹麦)梅森(Mason.J.S.) 合著者：张礼和

## 书籍目录

在药物发现中的应用——先导化合物发现 4.17 药物发现中的化学基因组学 成药性基因组和靶标分类性质 4.18 先导化合物发现, 及药物候选物优化中的复杂性和类先导性概念 4.19 虚拟筛选 4.20 筛选库的挑选和高通量筛选结果分析在药物发现中的应用——基于配体的先导化合物优化 4.21 药效团构建: 1——应用部分 4.22 拓扑定量构效关系的应用: 药物发现的结构信息表示 4.23 三维定量构效关系: 最新进展在药物发现中的应用——基于靶标结构的药物设计 4.24 基于结构的药物设计——药物发现中的蛋白质结构应用 4.25 分子动力学模拟在药物设计中的应用 4.26 7次跨膜G蛋白偶联受体: 根据结构和模拟进行药物设计探索 4.27 离子通道: 根据结构和模拟进行药物设计探索 4.28 核激素受体: 根据结构和模拟进行药物设计探索 4.29 酶: 根据结构进行药物设计探索新发展方向 4.30 药物发现中的多目标/多标准优化和决策支撑 4.31 基于结构药物设计的新应用 4.32 生物指纹图谱主题索引

### 编辑推荐

《药物化学百科9:计算机辅助药物设计(下)》编辑推荐：药物发现是一个多目标优化问题，设计和优化过程中必须在许多不同性质，例如活性、选择性和ADMET性质，以及在目前采用多“活性”模型(例如定量构效关系模型(QSAR)，或者像贝叶斯模型这样能更好地处理大的、噪声较多的数据集的统计模拟方法)的各种方法之间寻求平衡。

基于结构的药物设计方法无疑已经成为一种主要的CADD方法，提供了很多预见，并产生了很大的影响。

本卷讨论了其中的许多方面，《药物化学百科9:计算机辅助药物设计(下)》为上册，内容包括：计算机辅助药物设计导论、基于配体的药物设计的核心概念和方法、基于受体的药物设计的核心概念和方法、基于受体的药物设计的核心概念和方法。

版权说明

本站所提供下载的PDF图书仅提供预览和简介，请支持正版图书。

更多资源请访问:<http://www.tushu007.com>