第一图书网, tushu007.com

# <<计算机辅助药物设计导论>>

## 图书基本信息

书名：<<计算机辅助药物设计导论>>

13位ISBN编号：9787502549817

10位ISBN编号：7502549811

出版时间：2004-1

出版时间：化学工业出版社

作者：叶德泳

页数：225

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

计算机辅助药物设计是近年来发展起来的研究与开发新药的一种崭新技术，它大大加快了新药设计的速度，节省了创制新药工作的人力和物力，使药物学家能够以理论作指导，有目的地开发新药。

介绍计算机辅助药物设计涉及到多种基础学科和应用学科与技术。

为了适应不同学科、不同层次的读者需要，《计算机辅助药物设计导论》深入浅出地介绍了计算机辅助药物设计的入门知识，包括药物作用的基本理论，药物设计的基本概念与方法，计算机辅助药物设计的数据库系统、理论计算基础、相关测定技术以及对软硬件的要求等。

重点讲解计算机辅助药物设计的意义、作用和基本研究方法，选用一些典型的实例，并介绍最新的国内外研究成果，反映学科发展。

同时介绍常用软件，使《计算机辅助药物设计导论》兼具理论性和实用性。

书末附有参考文献和专业名词索引，便于读者进一步参考学习，还列出按各章节内容编排的综述性文献条目，供读者深入钻研之需。

《计算机辅助药物设计导论》作为综合性大学和医药院校的本科高年级学生和研究生的教学参考书，也可供有关科研人员和教师作参考。

# <<计算机辅助药物设计导论>>

## 书籍目录

1 计算机在药学相关学科中的应用简介?1.1 计算机辅助教学?1.2 临床药学?1.3 计算机药品管理系统?1.4 仪器分析智能化?1.5 计算机辅助谱图解析?1.6 生物大分子的结构分析?1.7 计算机辅助合成路线设计?1.8 化学制药过程?1.9 数据源的共享、国际联检与计算机网络通讯?1.10 药物筛选自动化?1.11 计算机化学?1.12 组合化学?1.13 蛋白质工程?1.14 计算机辅助药物设计2 药物设计的基本概念和理论基础?2.1 药物的化学结构?2.2 药物发现的途径与过程?2.3 药物作用的生物化学、细胞和分子生物学基础?2.4 药物作用的分子药理学基础?2.5 药物的化学结构与生物活性的关系(SAR)?2.6 定量构效关系(QSAR)?2.7 数据统计分析?2.8 三维定量构效关系(3D-QSAR)3 药物的化学信息计算机系统3.1 二维化学信息管理软件3.2 二维化学信息数据库3.3 三维化学信息管理软件3.4 三维化学信息数据库3.5 合成反应信息管理软件及数据库3.6 组合化学信息管理软件及数据库3.7 微机支持的化学管理软件及数据库3.8 其他化学智能计算系统3.9 生物信息数据库和软件3.10 药物的生物和化学信息网络资源4 有关理论计算、技术和设备4.1 理论计算基础4.2 重要技术4.3 计算机硬件和软件5 计算机辅助药物设计的意义5.1 计算机辅助药物设计的产生和作用5.2 计算机辅助药物设计的特征6 计算机辅助药物设计的方法学6.1 直接药物设计6.2 间接药物设计6.3 组合化学与合理药物设计相结合的策略6.4 用于计算机辅助药物设计的一些代表性软件7 计算机辅助药物设计应用实例7.1 用核磁共振和分子模型技术研究紫杉醇构象7.2 抗流感病毒药物设计--基于唾液酸酶结构的直接药物设计7.3 HIV蛋白酶抑制剂的设计--基于靶点结构的三维结构搜寻法直接药物设计7.4 抗寄生虫药物设计--经同源蛋白模建和三维结构搜寻的直接药物设计7.5 DHFR抑制剂的研究--受体受点的确定和原子生成法全新药物设计7.6 ACE拮抗剂的设计--计算机建立药效基团模型7.7 肾素抑制剂的设计--药物作用模型分析和分子碎片法全新药物设计7.8 5-HT?3受体拮抗剂的研究--间接药物设计7.9 HMG-CoA还原酶抑制剂的设计--重叠体积法3D-QSAR研究7.10 ALS抑制剂的研究--QSAR研究和药效基团模型法间接药物设计7.11 AChE抑制剂的研究和设计--QSAR研究和药物作用模型分析7.12 三唑类杀菌剂的设计研究--CoMFA法3D-QSAR研究7.13 口服凝血酶抑制剂的发现和开发--组合化学与基于结构的药物设计联用7.14 组织蛋白酶D抑制剂的设计--组合化学与基于结构的药物设计相结合7.15 抗SARS冠状病毒药物的设计--生物信息学分析和虚拟筛选8 结语 评价和展望参考文献9 附录9.1 进一步参考和选读文献9.2 主题词、软件名和药物名索引

第一图书网, tushu007.com



## 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