第一图书网, tushu007.com

<<计算机辅助药物分子设计>>

图书基本信息

书名：<<计算机辅助药物分子设计>>

13位ISBN编号：9787502555207

10位ISBN编号：750255520X

出版时间：2004-8

出版时间：化学工业出版社

作者：侯廷军,章威,徐筱杰,乔学斌

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

从20世纪90年代以后，随着计算机技术的发展以及药物化学、分子生物学和计算化学的发展，计算机辅助药物分子设计（CADD）已经发展成为一门完善和新兴的研究领域。
同时，CADD的发展和应用，也大大促进了药物设计和新药开发的效率。
CADD已经成为合理药物设计中不可或缺的一环，在药物设计中起着越来越重要的作用，因此，CADD方法的理论和应用研究具有非常重要的意义。
国内关于这方面的专著还很少，作者结合自己课题组的工作，并在参考大量文献以及大量研究实例的基础上，对CADD方法进行了系统而详尽的阐述。
本书对CADD的传统方法以及一些新的方法都进行了介绍，而且结合大量实例对药物设计的基本和具体操作进行了详尽的论述，是一本理论与实践相结合的论著。
本书对于从事药物研究的研究人员和教学工作者，是一本非常有益的参考书；本书所涉及的理论计算方法，对从事计算机化学、计算生物学、化学信息学以及生物信息学的研究工作者也具有重要的参考价值；本书也可以作为药化学、理论化学以及分子生物学等专业的大学生和研究生的参考书。

作者简介

徐筱杰教授简介
1960年毕业于北京大学化学系，教授，博士生导师，曾在美国纽约州立大学石溪分校，加州大学戴维斯分校，乔治城大学医学中心从事研究工作。
现任中国化学会计算化学委员会副主任，北京大学中医药现代化研究中心主任。
已发表论文200余篇，专著三本。

研究领域：
1. 药物设计方法及应用：着重发展分子对接，结合自由能及溶剂化能的计算，二维及三维构效关系，ADME预测及有关并行计算等相关方法及技术。

2. 中医药信息系统：构建及完善包括中药方剂，药用植物及中药有效成分的三维结构的医药信息系统及相关应用软件。

3. 超分子及介观体系的计算机模拟：利用分子动力学及介观动力学研究蛋白质、核酸等生物大分子及有机分子的聚集状态，高分子体系的聚集状态，介观形貌及相分离。

4. 基于中药资源的新药研制：已建成包括药物设计，靶酶制备及活性测定，活性追踪中药有效成分的分离纯化，利用分子烙印及药物抗体方法直接从中药体系中提取有效成分的工作平台。
目前正开展抗丙肝及抗肿瘤药物方面的研究。

书籍目录

第一章　药物研究及计算机辅助药物分子设计第一节 药物研究和开发的历史及现状第二节 现代药物研究的四大技术支柱一、分子生物学、基因组学及蛋白质组学二、组合化学三、高通量筛选四、与药物研究相关的信息科学及技术第三节 计算机辅助药物分子设计一、概述二、CADD方法的分类第二章　计算化学中的最优化方法第一节　引论一、 最优化问题概述二、 数学预备知识三、最优化条件第二节 数值最优化方法一、最优化算法的基本结构二、无约束问题的最优化方法第三章　计算化学中的非数值最优化方法第一节 引论一、计算复杂性二、局部搜索算法三、组合优化问题算法设计的思路第二节 模拟退火第三节 遗传算法第四节 神经网络一、人工神经网络基本模型简介二、用于优化计算的网络模型连续型Hopfield网络三、自组织网第四章　分子力场和力场参数化第一节 分子力场的势函数形式第二节 分子力场的分类一、 传统力场二、第二代力场三、 通用力场四、其他力场第三节 力场参数的拟合第五章　构象分析方法第一节 小分子的构象分析方法一、系统搜索方法二、片段连接方法三、随机搜索方法四、距离几何方法五、分子动力学方法六、基于遗传算法的构象分析方法第二节 蛋白质结构的预测第六章　分子动力学第一节 积分方法第二节 初始化第三节 粒子受力的求算 第四节 边界条件第五节 非键相互作用能的处理一、截断值方法二、FMM方法三、Barnes?Huts算法四、周期性边界条件方法第六节 约束条件动力学第七节 恒温和恒压分子动力学第八节 分子动力学轨迹分析第七章　溶剂效应第一节 显示溶剂模型第二节 连续介质模型一、表面加和模型二、泊松?玻耳兹曼模型三、GB/SA模型四、模型多级矩展开方法五、极化的连续介质模型六、SMx系列溶剂化模型第八章　结合自由能计算第一节　引言一、 熵增加原理和Gibbs自由能二、受体?配体结合的亲和力三、自由能计算方法的分类第二节 自由能微扰和热力学积分方法三、FEP和TI在药物设计中的应用第三节 基于主方程的自由能计算方法一、MM/PBSA方法的原理二、MM/PBSA方法的应用三、MM/PBSA方法的发展和完善第四节 基于经验方程的自由能预测一、B?hm的自由能预测模型二、Eldredge的自由能预测模型三、Head的自由能预测模型第五节 LIE方法第九章　定量构效关系方法研究第一节　二维定量构效关系方法一、Hansch法二、Free?Wilson法三、各种参数第二节 建立定量构效关系模型的统计方法一、回归分析二、遗传算法三、人工神经网络第三节 三维定量构效关系方法一、距离几何3D?QSAR二、分子形状分析三、比较分子场分析方法四、虚拟受体方法第四节 QSAR的应用一、2D?QSAR的应用二、3D?QSAR的应用参考文献第十章　药效团模型方法第一节 药效团模型的表达一、药效特征元素二、几何约束第二节 药效团模型的识别一、药效团识别的基本步骤二、分子叠合和活性构象第三节 基于药效团模型的数据库搜索一、基于药效团的数据库搜索二、柔性构象搜索第四节 药效团识别系统一、Receptor二、Apex?3D三、DISCO四、GASP五、CATALYST六、几种药效团识别系统的性能比较第五节 药效团模型方法的应用一、Muscarinic M3受体拮抗剂的设计二、5?HT3受体拮抗剂的设计三、MC增生抑制剂的设计四、PKC抑制剂的设计五、HIV 1整合酶抑制剂的设计第十一章　分子对接方法第一节 分子对接的原理一、分子对接的理论基础二、分子对接方法的分类三、分子对接方法中的重要问题第二节 几种有代表性的分子对接方法一、DOCK二、AUTODOCK三、FlexX四、Affinity五、LigandFit六、SFDOCK第三节 虚拟筛选的策略第四节 分子对接在药物设计中的应用一、胸苷酸合成酶抑制剂的设计二、DHFR抑制剂的设计三、EGFR和抑制剂间相互作用模式的研究第十二章　从头设计方法第一节 从头设计方法的分类一、片段定位法二、位点连接法三、片段连接法四、逐步生长法第二节 几种重要的从头设计方法一、GRID二、MCSS三、HINT四、LUDI五、Leapfrog第三节 从头设计在药物开发中的应用一、f X a抑制剂的设计二、全新FKBP?12配体的设计第十三章　分子三维结构数据库和虚拟组合化学第一节 三维结构数据库一、剑桥结构数据库二、国家癌症研究所三、Available Chemicals Directory 3D(ACD?3D)四、Available Chemicals Directory?Screening(ACD?SC)五、MDL Drug Data Report 3D(MDDR?3D)六、Comprehensive Medicinal Chemistry(CMC)七、类似物设计的结构数据库BIOSTER八、Chapman & Hall Dictionary of Natural Product(DNP)九、Metabolite十、Toxicity十一、中草药三维结构数据库第二节 分子结构的拓扑表达和结构转化一、分子结构的拓扑表达二、分子三维结构的转化第三节 数据库搜索技术一、子结构匹配二、相似性搜索第四节 重要的三维结构搜索系统一、MDL/Base二、Unity第五节 计算组合化学方法第十四章　药代动力学特征和毒性的预测第一节 药代动力学特征的预测一、脂水分配系数二、脑血分配系数三、肠通透性四、水溶性第二节 分子毒性的预测一、引论二

、计算机辅助的化合物毒性预测方法三、常见化合物毒性预测软件第十五章　EGF?R和抑制剂间相互作用模式的研究第一节 酪氨酸蛋白激酶一、PTK的结构特征二、EGF?R的结构特征三、EGF?R抑制剂的分类第二节 苯胺喹唑啉类抑制剂的三维构效关系第三节 EGF?R和喹唑啉类抑制剂结合模式的预测第十六章　HIV?1蛋白酶抑制剂的设计第一节 HIV?1病毒的结构和侵袭靶细胞的机制第二节 基于HIV蛋白酶的抑制剂设计附录一分子模拟方法中常用概念和名词一、分子坐标表示二、分子表面三、分子图形显示模型四、量化计算常见术语简介附录二药物分子设计中常用软件列表1?大型分子模拟软件系统2?小型分子模拟软件系统3?小型药物设计软件系统4?常用量化计算软件5?分子力学、分子动力学和蒙特卡罗模拟软件6?QSAR和分子参数计算软件7?药效团模拟软件8?分子对接软件9?从头设计方法10?分子相似性和差异性分析以及组合库设计11?药代动力学和毒性预测软件12?蛋白质三维结构模建、结构评估和活性位点预测软件13?数据库搜索软件14?分子叠合15?二维转三维和文件格式转换软件16?分子显示软件17?求解PB方程的软件18?化学软件开发包19?国内主要软件代理商的相关信息

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