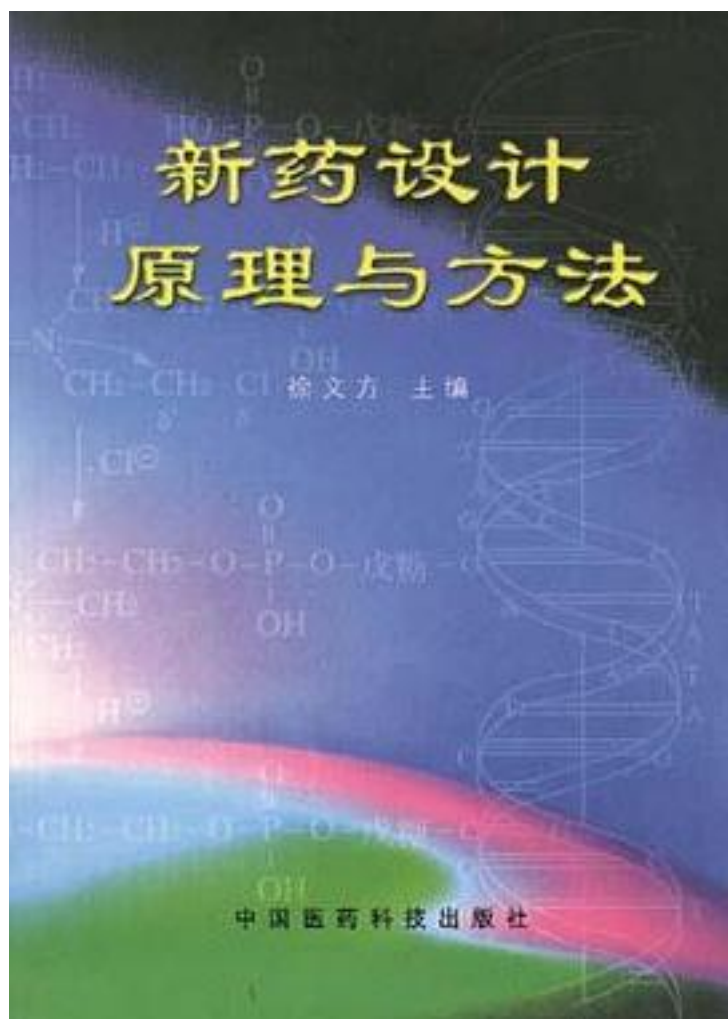


新药设计原理与方法



[新药设计原理与方法_下载链接1](#)

著者:

出版者:中国医药科技出版社

出版时间:1996-08

装帧:平装

isbn:9787506715867

本书在内容上分为两个部分。前五章着重介绍药作用的分子生物学和分子药理学基础，

对药物作用的受体生物大分子——蛋白质和核酸的结构、功能以及与药物间的相互作用作了阐述。别外，机体中药物所作用的这些受体决不可能是为外源性的药物而存在的，机体中都有其相应的小分子生物活性物质作为配基，外源性药物实际上是有意或无意，直接或间接地模拟了这些内源性活性物质而对机体起到药理调节作用的。

作者介绍:

目录: 目 录

第一章 概论

第一节 新药研究现状与未来趋势

一 国内外新药研究概况

二 21世纪新药研究的趋势与方向

第二节 新药研究的近代发展

第三节 新药设计的一般方法

最佳化合物设计

二 药物的类型衍化

第四节 新药研究筛选过程

新药临床前初筛程序

二 新药规范化筛选程序

第二章 药物作用的分子生物学基础

第一节 机体生物大分子的结构与功能

一 生物大分子结构方面的特征与共性

二 生物大分子功能方面的特征与共性

第二节 生物膜的结构与功能

一 生物膜的化学组成

二 生物膜的分子结构

三 生物膜的液晶态

四 生物膜的物质转运调节及其分子药理

第三章 药物作用的分子药理学基础

第一节 受体的结构、性质和类别

第二节 药物—受体相互作用的化学本质

一 共价键结合

二 非共价键的相互作用

第三节 药物—受体相互适应的锁—钥关系

一 药物与受体的互补性

二 原子间距离对药物—受体互补的影响

三 影响药物—受体契合的立体化学因素

第四节 药物—受体相互作用的动力学学说

占领学说

三 速率学说

三 诱导契合学说

四 变构学说

第四章 机体内源性活性调节物质—受体机理与新药设计

第一节 机体内的信息传递与内源性调节物质

一 内源性生物活性调节物质的一般概念

二 内源性生物活性调节物质的分子机理与类别

第二节 含氮类内源性调节物—受体机理与有关新药设计

一 环腺—磷（cAMP）中介激活类

二 环鸟—磷（cGMP）中介激活类

三 两类中介激活物的细胞内制约调节

四 调节第二、三信使的新药设计

第三节 甾类内源性调节物的分子机理与有关新药设计

- 一 甾类内源性调节物的分子机理
- 二 胞浆受体的选择性结合与有关新药设计
- 三 基因激活与有关的新药设计
- 第五章 新药先导化合物的发掘与药效几何模型的确定
- 第一节 先导化合物的发现
- 广泛筛选
- 二 意外发现
- 第二节 先导化合物的定向发掘
- 一 动植物和微生物中天然活性成分的分离
- 二 生命基础过程研究中发现先导化合物
- 三 现有药物总结性研究中发现先导化合物
- 第六章 生物电子等排原理与新药设计
- 第一节 生物电子等排体的发展演化过程
- 第二节 经典的生物电子等排体在新药设计中的应用
- 一 一价原子或基团的取代
- 二 二价原子或基团的交换
- 三 三价原子或基团的交换
- 第三节 非经典的生物电子等排体在新药设计中的应用
- 一 基团反转
- 二 环系的打开与关闭
- 三 极性相似基团的交换
- 第七章 前药原理与新药设计
- 第一节 前药原理的一般概念
- 一 与前药体内活化有关酶系
- 二 前药设计的目的与方法
- 第二节 前药原理在新药设计中的应用
- 一 改善药物的体内动力学特性
- 二 降低药物的毒副作用
- 三 掩蔽药物的不适气味
- 四 前药原理的其它应用
- 第三节 靶向药物的设计
- 一 用于介导靶向药物的受体
- 二 靶向抗癌药物的设计
- 三 药物—载体的偶联方法
- 第八章 抗代谢原理与新药设计
- 第一节 抗代谢原理的一般概念
- 一 核酸的化学
- 二 核苷酸的生物合成
- 三 蛋白质的结构
- 四 蛋白质的生物合成
- 五 酶的基础知识
- 第二节 抗代谢类抗癌药的设计
- 一 叶酸类抗代谢物的设计
- 二 嘌呤类抗代谢物的设计
- 三 嘧啶类抗代谢物的设计
- 四 氨基酸类抗代谢物的设计
- 第三节 酶抑制剂类药物的设计
- 一 β -内酰胺酶抑制剂的设计
- 二 血管紧张素转化酶抑制剂的设计
- 三 戊二酰辅酶A还原酶抑制剂的设计
- ? 四? 定量构效关系原理与新药设计
- 第一节 定量构效关系的一般概念
- 一 定量构效关系的产生与发展
- 二 定量构效关系研究中的Hansch方法

- 三 Hansch方法使用的参数
- 四 Hansch方法的研究步骤
- 五 定量构效关系研究中的Topliss方法
- 第二节 定量构效关系在新药设计中的应用
 - 一 预测同源化合物的生物活性
 - 二 指导药物的设计与合成
 - 三 帮助了解药物的受体图像
- 第三节 定量构效关系的其它研究方法
 - 一 Free—Wilson方法
 - 二 分子连接性方法
 - 三 其它方法
- 第十章 计算机辅助药物设计原理与方法
 - 第一节 计算机辅助药物设计的基本原理
 - 第二节 计算机辅助药物设计的常用方法
 - 一 活性类似物近似法
 - 二 比较分子场分析法
 - 三 电荷空间分布分析法
 - 四 距离几何法
 - 五 受体图像分析法
 - 第三节 计算机技术在新药设计中的应用
 - 一 COMFA方法在激素类研究中的应用
 - 二 血管紧张素转化酶（ACE）抑制剂的设计
 - 三 丝裂霉素的三维结构活性研究
 - 四 以HIV—1蛋白酶为受体的药物设计
- 附录一 QSAR研究中常见取代基的各结构参数
- 附录二 Wiswesser线性表示法（WLN）的意义及各符号的含义
 - • • • • (收起)

[新药设计原理与方法_下载链接1](#)

标签

评论

[新药设计原理与方法_下载链接1](#)

书评

[新药设计原理与方法 下载链接1](#)