

药物分子设计



[药物分子设计 下载链接1](#)

著者:[德] Gisbert Schneider

出版者:华东理工大学出版社

出版时间:2012-3-1

装帧:平装

isbn:9787562832287

《药物分子设计:从入门到精通》采用浅显易懂的语言，系统介绍了计算机辅助药物发现和设计的基本概念和原理，重点介绍了药物分子设计技术，并辅以精心挑选的应用实例和案例分析。《药物分子设计:从入门到精通》由药物分子设计领域的国际著名专家编著，图文并茂，既有适合于初学者入门的最基本原理，也有适合于有经验分子模拟人员提高的最前沿虚拟筛选和分子设计技术。因此，《药物分子设计:从入门到精通》不但可作为药学、化学和生物学等相关专业学生学习药物分子设计的入门教科书，也可作为药物发现科研人员以及其他感兴趣人员的学习参考书。

作者介绍:

Gisbert

Schneider是德国法兰克福歌德大学化学和生物信息学教授。进入歌德大学之前，他在瑞士巴塞尔罗氏制药公司领导化学信息学小组。他的研究兴趣主要是采用计算机辅助技术合理设计生物活性分子，他在歌德大学领导的分子设计实验室（modlab）致力于开发分子从头设计、虚拟筛选、骨架跃迁等方法。他著有多本有关虚拟筛选和药物设计的书籍；Karl-Hainz

Baringhaus目前是位于德国法兰克福的赛诺菲—安万特制药公司药物设计部主任。他从德国明斯特大学获得合成有机化学博士学位，随后在美国斯坦福大学进行博士后研究，1991年加入Hoechst制药公司药物化学部。6年后，他进入分子模拟部门，1998年成为分子模拟部门负责人，2000年成为德国安万特制药公司计算化学部门负责人。

目录: 第1章 分子概念与设计目标

1.1 什么是分子?

1.2 分子的简化表达

1.3 分子表面

1.4 分子形状

1.5 分子拓扑图形

1.6 分子性质和图形不变量

1.7 类药性概念

1.8 骨架，连接子和侧链

1.9 子结构相似性和“优势结构”

1.10 分子的字符串表达

1.11 从字符串入手构建分子

1.12 从元素符号到原子类型

1.13 进入第三维：自动构象生成

1.14 生物活性构象

参考文献

第2章 受体—配体相互作用

2.1 蛋白—配体相互作用的热力学

2.2 熵的贡献

2.3 从理论到实验： K_i 和 IC_{50} 值

2.4 QSAR：定量评估结构—活性关系

2.4.1 Free—Wilson分析

2.4.2 Hansch模型

2.4.3 3D-QSAR

2.5 受体—配体相互作用类型

2.6 生物效应团的概念

2.7 潜在药效点

2.8 用相关矢量构建药效团模型

2.9 “硬球”和“模糊”药效团模型

2.10 自动配体对接和打分的教训：什么可行及什么不可行

2.11 象手套一样适合：另类的配体结合模式及诱导契合效应

参考文献

第3章 产生设计

3.1 为什么需要计算机辅助分子设计

3.2 药物靶标的数目有限

3.3 配体结合位点

3.4 基于配体的化合物库设计

3.5 相似化合物未必以相似的方式与靶标结合

3.6 同一配体可有多多个结合模式

3.7 GPCR是一类具有挑战性的靶标家族

- 3.8 天然产物是灵感之源
- 3.9 过渡态类似物是强效酶抑制剂
- 3.10 新靶标有时需要新的配体设计理念
- 3.11 从头设计概念
- 3.12 从头设计中的主要和次要限制

参考文献

第4章 虚拟筛选

- 4.1 药物发现流程
- 4.2 高通量筛选 (HTS) 为何能成功?
- 4.3 从命中化合物到先导化合物
- 4.4 设计过程的合理化
- 4.5 从高多样性到低多样性
- 4.6 多样性难以定量化
- 4.7 从负设计到正设计
- 4.8 注意频繁命中的分子
- 4.9 形状匹配—粗略的过滤步骤
- 4.10 终极目标: 骨架跃迁
- 4.11 集中库的化学多样性评价
- 4.12 虚拟筛选得到新骨架化合物的成功实例
- 4.13 案例分析
 - 4.13.1 Kv1.5离子通道调节剂的设计
 - 4.13.2 从天然产物衍生的组合库虚拟筛选发现新型5-脂氧酶抑制剂
 - 4.13.3 大麻素受体CB-1配体骨架的从头设计

参考文献

第5章 其它设计要求和机器学习方法

- 5.1 物理化学和药物动力学
- 5.2 五倍律
- 5.3 药物动力学
- 5.4 吸收
- 5.5 分布
- 5.6 代谢
- 5.7 消除
- 5.8 毒性
- 5.9 前药和生物电子等排体
- 5.10 机器学习方法辅助先导物的发现和优化
- 5.11 一个重要的步骤: 数据缩放
- 5.12 应用机器学习方法进行化合物库设计
- 5.13 药效团路线图
- 5.14 案例分析
 - 5.14.1 代谢型谷氨酸受体mGluR变构调节剂的交叉活性预测
 - 5.14.2 多巴胺D3受体拮抗剂和血管紧张素转化酶ACE抑制剂
 - 5.14.3 用于组合优化的人工蚂蚁系统

参考文献

附录: 专业词汇中英文对照

• • • • • ([收起](#))

[药物分子设计_下载链接1](#)

标签

药物

医药

化学

药物分子设计

生物

评论

好多细节没讲透。。。

科普向，简明扼要，细节缺失。

[药物分子设计_下载链接1](#)

书评

[药物分子设计_下载链接1](#)