

<<计算机辅助药物设计（上）>>

图书基本信息

书名：<<计算机辅助药物设计（上）>>

13位ISBN编号：9787030202482

10位ISBN编号：7030202481

出版时间：2007-10

出版时间：科学

作者：梅森

页数：420

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>

<<计算机辅助药物设计(上)>>

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。

<<计算机辅助药物设计(上)>>

书籍目录

引言前言总编第4卷主编第4卷编委计算机辅助药物设计导论 4.01 本卷绪论——概述药物发现过程中的计算机辅助药物设计 4.02 计算机辅助药物设计概论——现状和未来的发展 4.03 定量构效关系——历史回顾和未来发展 4.04 基于结构的药物设计——历史回顾和未来发展基于配体的药物设计的核心概念和方法 4.05 基于配体的药物设计方法：分子模拟核心技术 4.06 药效团构建：1——方法学部分 4.07 预测性定量构效关系模型 4.08 根据分子相似性和非相似性测度的化合物选择基于受体的药物设计的核心概念和方法 4.09 配体受体相互作用的结构、能量和动力学性质 4.10 药物靶标蛋白结构的比较模建 4.11 应用分子作用场表征蛋白结合位点和配体 4.12 分子对接和打分 4.13 全新药物设计基于配体和受体的核心方法及其应用 4.14 化合物库设计：基于配体和受体设计平行和组合库的原理 4.15 化合物库设计：基于反应物和产物的设计方法 4.16 药物化学中的量子力学计算：是有用的方法，还是遥遥无期的“量子跳跃”？

<<计算机辅助药物设计(上)>>

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，本书为上册，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。

<<计算机辅助药物设计（上）>>

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>