

<<药物化学实验方法学>>

图书基本信息

书名：<<药物化学实验方法学>>

13位ISBN编号：9787117124669

10位ISBN编号：7117124660

出版时间：2010-6

出版时间：人民卫生出版社

作者：徐文方 主编

页数：243

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>

## <<药物化学实验方法学>>

### 内容概要

本书是药物化学专业研究人员从事科研工作的必备参考书。

其内容围绕药物化学研究的整个过程，系统讲解相关实验方法。

包括药物分子设计，目标化合物合成、纯化和结构确证，体内外初步的药效学评价，以及最后应用构效关系进行总结。

在内容编排上着重阐述实验方法的操作规范和相关注意事项，帮助读者举一反三，培养其能够独立分析、解决问题的能力。

本书可作为药物化学专业及药学相关专业的研究生教材，也可供从事创新药物研究的科研人员参考。

## &lt;&lt;药物化学实验方法学&gt;&gt;

## 书籍目录

第一章 基于靶点的药物发现 第一节 基本理论计算基础 一、量子化学 二、分子力学 三、分子动力学 四、分子动力学实验方法 第二节 分子对接技术 一、实验方法及操作步骤 二、分子对接进行药物设计举例 第三节 蛋白质同源建模技术 一、实验方法及操作步骤 二、同源建模应用举例第二章 基于药效团的药物发现 第一节 药效团技术基本原理 一、药效团的基本概念 二、药效特征元素的定义 第二节 药效团模型的构建方法 一、基于配体活性小分子共同特征的药效团 二、基于受体结构的药效团 第三节 药效团实验方法和操作步骤 一、基于配体共同特征的药效团 二、基于化合物构效关系的药效团构建 三、基于受体结构的药效团 第四节 药效团方法运用案例 一、HIV-1整合酶抑制剂的发现 二、HIV-1整合酶抑制剂的结构优化 三、基于受体结构的药效团第三章 类药化合物的合成路线设计与优选 第一节 类药化合物合成路线的设计策略 一、有机合成设计理论与逆合成分析法 二、类型反应法 三、模拟文献法 第二节 逆合成分析法 一、逆合成分析的有关概念 二、逆合成分析的常见切断方式 三、逆合成分析理论的应用 四、逆合成分析方法的局限性 第三节 药物合成反应的文献调研 一、常用的化学类三次文献信息资源 二、美国化学文摘 三、贝尔斯坦有机化学大全 第四节 类药化合物合成路线选择与评价原则 一、原料和试剂的来源 二、合成步骤、操作与收率 三、单元反应的次序安排 四、技术条件与实验安全第四章 药物合成实验研究的思路与常用方法 第一节 药物合成实验室工作规范 一、实验室安全是首要责任 二、学术道德及实验记录规范 三、实验记录模板 第二节 影响药物合成反应的常见因素 一、反应物料的配比与浓度 二、温度 三、压力 四、加料方式与加料顺序 五、溶剂 六、酸碱度(pH) 七、搅拌 八、杂质与原料的纯度 第三节 药物合成工艺研究的常用方法 一、应用新试剂或新反应 二、后处理方法的改进 三、正交设计 四、微波合成反应 第四节 药物合成路线探索的一般步骤 一、如何研究单元反应 二、药物合成工艺路线探索实例第五章 类药化合物合成的实验技术 第一节 药物合成反应基本操作 一、基本操作简介 二、加热、回流 三、冷却 四、搅拌 五、通气 六、无水无氧反应 七、半微量操作 第二节 反应终点的监测 一、TLC简介及基本操作 二、HPLC监测反应进程的基本操作 三、GC监测反应进程的基本操作 四、其他方法第六章 类药化合物的分离纯化与结构确证 第一节 类药化合物制备的常用分离与纯化技术 一、蒸馏 二、重结晶 三、柱层析 四、快速柱层析 五、制备薄层色谱 六、制备高效液相 第二节 类药化合物的结构解析 一、化合物纯度鉴定的常用方法 二、化学鉴定 三、元素分析 四、波谱解析 第三节 药物合成产品的结构确证范例 一、元素分析 二、紫外吸收光谱 三、红外吸收光谱 四、核磁共振氢谱( $^1\text{H NMR}$ ) 五、核磁共振碳谱( $^{13}\text{C NMR}$ ) 六、质谱 七、热分析 八、热重量分析 九、X-粉末衍射 十、综合解析第七章 类药化合物的初步活性评价 第一节 常用药理活性评价方法简介 一、分子水平的活性评价 二、细胞水平的活性评价 三、动物水平的活性评价 第二节 类药化合物在分子水平上的活性评价 一、基于酶活性的先导化合物评价方法 二、基于受体活性的先导化合物评价方法 三、基于离子通道的先导化合物活性评价 第三节 类药化合物在细胞水平上的活性评价方法 一、抗肿瘤药物细胞水平的活性评价方法 二、抗菌药物的活性评价方法 三、抗病毒药物的活性评价方法 第四节 基本统计学方法与试验数据的处理 一、统计学的基本概念 二、常用的量反应资料统计方法 三、质反应的显著性检验 第五节 应用举例 一、目标化合物抑制氨肽酶N的活性试验(In vitro) 二、目标化合物抑制明胶酶的活性试验(In vitro) 三、目标化合物对白血病细胞生长抑制试验 四、目标化合物对人卵巢黏液囊腺上皮癌细胞的生长抑制以及明胶酶谱分析试验 五、目标化合物抑制荷肝癌H22小鼠血道转移以及碳粒廓清实验第八章 QSAR研究方法及其结构优化 第一节 QSAR的基本原理与方法 一、二维定量构效关系 二、三维定量构效关系 三、四维和五维定量构效关系 第二节 CoMFA和Toporner CoMFA研究的一般步骤及注意事项 一、实验流程 二、实验软硬件基础 三、应用CoMFA方法建立定量构效关系模型 四、Toporner CoMFA与Toporner Search 第三节 定量构效关系在新药研究中的应用实例 一、CoMFA模型的应用 二、Toporner CoMFA的应用索引

## <<药物化学实验方法学>>

### 编辑推荐

《药物化学实验方法学》在写作中突出了实验方法的实用性，写作素材尽量取材于研究生培养过程中常见的问题。

在编写过程中，力图通过必要的基本原理介绍，并结合实际工作中总结出来的各种注意事项，有针对性地帮助研究生解决实际工作中可能会遇到的具体问题，从而使学生掌握严格的基本实验技能训练，以适应今后科研工作中可能会遇到的各种挑战。

另一方面，《药物化学实验方法学》内容还涉及许多的学科前沿知识，这些内容在本科教学中很少提及或几乎没有接触，如计算机辅助药物设计软件操作和微波合成等方法。

它们代表着学科发展的前沿，在发展过程中也出现了由不同公司开发的技术设备和操作规程。

其实，它们的基本原理都是相同的，《药物化学实验方法学》在编写中将首先简要介绍其基本原理，然后选择代表学科发展且日趋成熟的主流软件或仪器设备进行相关的基本操作介绍。

<<药物化学实验方法学>>

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>