

<<药物化学选论>>

图书基本信息

书名：<<药物化学选论>>

13位ISBN编号：9787560980331

10位ISBN编号：7560980333

出版时间：2012-10

出版时间：华中科技大学出版社

作者：许军，李伟 主编

页数：355

字数：466000

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>

## <<药物化学选论>>

### 前言

二十一世纪的今天, 药物发展日新月异, 药物改善了我们的生活, 延长了我们的寿命。

《药物化学选论》根据21世纪我国药学人才培养的需要而编写, 阐述了药物发现的现象和寻找途径、药物设计原理和合成、药物在体内发生的与代谢有关的化学变化及与生物活性的关系等内容, 为设计和开发新的药物打下了理论基础。

药物化学学科和其他相关学科共同发展、相互促进。

为了适应现代药物化学的发展, 本书重点介绍了先导化合物的来源与优化、药物设计原理和方法、药物合成路线及方法、药物体内过程及药物作用细胞生物学原理、创新药物研究与开发, 以及药物研究进展。

本书立足于研究生层次, 培养创新型研究人才。

本书适用于药学类专业研究生和高年级本科生的教学, 也可供药学工作者参考。

本书分为7章。

江西中医学院许军编写第1章, 长春工业大学张龙和米浩宇编写第2章, 南京中医药大学李念光编写第3章, 南京中医药大学李伟编写第4章, 江西中医学院黄洪林编写第5章, 湖南中医药大学张春桃编写第6章, 江西中医学院许军和熊俭编写第7章, 江西中医学院刘燕华协助统稿。

本书的编写和出版得到了华中科技大学出版社、参编学校各级领导和有关专家的大力支持与帮助, 在此一并表示衷心的感谢。

## <<药物化学选论>>

### 内容概要

药物化学选论分为七章，内容包括绪论、先导化合物的来源与优化、药物设计原理和方法、药物合成路线及方法、药物体内过程及药物作用细胞生物学原理、创新药物研究与开发，以及药物研究进展。

《药物化学选论》立足于研究生层次，培养创新型研究人才，根据药物化学及相关学科的教学要求，以突出基础和创新为特点。

本书的内容围绕研究生所需掌握的基本知识与概念展开，侧重药物的研究、发现知识的阐述。

《药物化学选论》适用于药物化学、中药化学、药物分析学、药物制剂、制药工程等专业研究生和高年级本科生的教学，也可供药学工作者参考。

## &lt;&lt;药物化学选论&gt;&gt;

## 书籍目录

- 第一章 绪论
- 第二章 先导化合物的来源与优化
  - 第一节 先导化合物的主要来源
  - 第二节 通过系统筛选法获得先导化合物
  - 第三节 通过对现有药物改造获得先导化合物
  - 第四节 合理药物设计与先导化合物发掘
  - 第五节 先导化合物优化
- 第三章 药物设计原理和特点
  - 第一节 以酶为靶标的药物设计
  - 第二节 基于药物代谢原理的药物设计
  - 第三节 基于生物电子等排原理的药物设计
  - 第四节 基于组合化学库的药物设计
  - 第五节 基于化学基因组学的药物设计
  - 第六节 计算机辅助药物设计
- 第四章 药物合成路线及方法
  - 第一节 药物合成路线设计方法
  - 第二节 药物合成路线选择
  - 第三节 代表药物合成路线及方法
- 第五章 药物体内过程及药物作用细胞生物学原理
  - 第一节 药物的体内过程
  - 第二节 药物代谢反应类型
  - 第三节 药物与受体相互作用的基本理论
  - 第四节 细胞信息传递与药物研究
- 第六章 创新药物研究与开发
  - 第一节 国内外新药研发简史、现状与趋势
  - 第二节 新药研究与开发过程
  - 第三节 新药注册分类及新药研究相关法规
  - 第四节 新药申报与审批程序
  - 第五节 新药研发药学资料研究撰写
  - 第六节 新药研发中知识产权保护
- 第七章 药物研究进展
  - 第一节 抗肿瘤药物研究进展
  - 第二节 抗病毒药物研究进展
  - 第三节 抗高血压药物研究进展
  - 第四节 抗消化性溃疡药物研究进展
  - 第五节 降血糖药物研究进展
  - 第六节 精神障碍治疗药物研究进展
- 参考文献

## 章节摘录

版权页：4) 分子形状分析法 分子形状分析 (molecular shape analysis, MSA) 法是Hopfinger在1980年发表的一种3D—QSAR研究方法。

MSA认为, 柔性分子可以有多种构象, 因此有多种形状, 而受体对所能接受的配基的形状是有要求的, 所有分子的活性就与配基分子形状对受体腔的适应能力有关。

MSA使用一些可以表达分子形状的参数, 如以体系参照分子的重叠体积、分子势场积分差异等作为变量, 经统计分析求出QSAR关系式。

MSA把经典Hansch分析的变量扩展到包含分子三维结构的形状参数, 使QSAR关系式更精确, 同时也为研究药物受体作用模型提供参考。

MSA变量的选择, 先要确定药物分子的体系的活性构象, 以此作为分子体系的参照构象, 通过药物分子相应构象和这一参照构象的合理重叠来求出分子的分子形状参数, 参照构象的选取的可靠性是MSA成功的保证。

MSA一般选取多个活性化合物的几个低能构象分别作为参照构象, 以统计性能的优良来确定体系的参照构象, 以此保证找到正确的参照构象。

Hopfinger首先选用的分子形状参数是药物分子与参照构象的公共重叠体积 (common overlap volume), 其定义为参照分子的体积与药物分子的体积之和再减去两分子重叠所占的总体积。

用此参数对DHFR的三类抑制剂作的QSAR分析结果良好, 利用此结果还设计了6个新化合物并预测其活性, 合成物与预测值相差不大。

Hopfinger又从分子周围势场的概念出发, 即药物受体的作用取决于药物分子周围势场与受体周围势场的互补性, 定义了第二代分子形状参数。

分子周围势场可通过计算探针分子或原子、原子团在空间各处与药物分子的作用而能得到, 它与分子中原子数目、探针与分子中原子类型及距离、探针和分子内原子上的净电荷有关。

利用此参数对苯基嘧啶类DHFR抑制剂的QSAR研究得到了良好的关系式。

为了保证与参照分子形状相似, 药效构象一般不能取最低能量构象。

Hopfinger还定义了形状指标, 它与重叠体积、势场分布以及构象能差值有关。

以这一形状指标对三嗪类DHFR抑制剂进行QSAR分析, 也得到了较好的结果。

还有多种引入分子形状和体积的3D—QSAR方法。

比如重叠体积法 (superposed van der Waals volume) 将最强活性化合物的优势构象重叠, 以其范德华总体积作为受体模型, 把活性最强的化合物总体积按活性由强至弱的次序与化合物范德华体积重叠, 超出受体模型的部分作为与受体不适应的部分, 将导致活性的降低。

另一种重叠体积的方法是将数个活性最强化合物的优化构象相重叠作为参比体积, 将各化合物的范德华体积与参比体积重叠。

<<药物化学选论>>

编辑推荐

《全国高等医药院校研究生规划教材:药物化学选论》适用于药物化学、中药化学、药物分析学、药物制剂、制药工程等专业研究生和高年级本科生的教学，也可供药学工作者参考。

<<药物化学选论>>

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>