

<<药物分析信息学及应用>>

图书基本信息

书名：<<药物分析信息学及应用>>

13位ISBN编号：9787117116121

10位ISBN编号：7117116129

出版时间：2009-11

出版单位：人民卫生出版社

作者：吴玉田 等主编

页数：225

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>

<<药物分析信息学及应用>>

内容概要

当今时代的基本特征是信息爆炸。

围绕在我们周围，信息量之大，传播速度之快前所未有。

从学科发展角度深刻把握药物质量问题的信息特征，按分析科学和信息学的原理揭示药物质量问题的本质，有助于学生掌握药物分析学的核心，从信息的获得、信息的处理、信息的管理到信息的共享，给学生一个全新的视角和思路，这是本书的宗旨。

本书取名为药物分析信息学及应用，意指对以药物质量相关问题为主要研究对象的分析化学信息进行表达、解析、模拟、管理和传输，揭示分析化学信息的实质与内在联系。

实现分析化学信息的获得、挖掘、变换与共享，不仅有助于分析化学的深化和发展，促进药学分析学科的发展，也有助于以分析化学信息学的视角考量和解决以分析化学为技术手段的相关学科，包括生命科学、环境科学、化学化工等学科目前面临的实现复杂物质体系定性定量描述的共同任务，以迎接新的挑战。

复杂物质体系分析是21世纪的重大研究课题。

几乎所有与化学有关的各行各业都有复杂物质体系分析的任务，从生命科学角度看，特别是复杂有机物质体系分析的任务。

如生命与各种生命现象的物质基础，复方药物制剂，天然产物、中药及其提取物，食品、生物样品、体液、临床分析样品等的定性定量。

复杂物质体系化学信息的主要特征是：组成复杂，组分多且多变化；各组分含量相差悬殊，含未知组分及其他不确定因素。

目前复杂物质体系定性定量描述的最佳技术之一是特征（指纹）谱分析。

凡是与待分析物质的特性与含量具有函数或相关关系的稳定信息，都可以通过特征提取、信息挖掘、信息变换、信息压缩以及信息可视化制备特征谱，通过特征谱比对和其中主成分相对量的表达对该物质进行定性定量描述（定性：是什么、存在与否、有没有变化；定量：准确定量或确定上下限范围）

。

<<药物分析信息学及应用>>

书籍目录

第一篇 药物分析信息学基础	第一章 绪论	一、分析化学发展趋势——分析化学、分析科学到分析化学信息学	(一) 从分析化学的定义说起	(二) 分析化学已经发展到分析科学、分析化学信息学阶段	二、现代药物分析——药学中的分析化学信息学(药物分析信息学)	(一) 获取化学量测数据	(二) 从分析数据中提取有价值信息	(三) 信息管理(存储、传输和共享)	三、药物分析信息学主要研究方向	(一) 复杂物质体系分析的方法学研究	(二) 现代药物分析应用研究	(三) 分析仪器的智能化研究													
第二章 药物分析信息的获得	第一节 常见样品制备及前处理	一、天然药物	(一) 原料(药材)的品种鉴定	(二) 原料(药材)的粉碎	(三) 天然药物的提取	(四) 天然药物的分离与纯化	二、生物样品	(一) 常用生物样品采集及储存	第二节 光谱分析法及数据特点	一、电磁辐射及其与物质的相互作用	二、光谱分析法的定义及分类	(一) 吸收光谱法	(二) 发射光谱法	(三) 质谱法	三、光学分析仪器的基本组成	四、光谱数据特点	第三节 色谱分析法及数据特点	一、色谱分析法的定义及分类	二、色谱分离原理	(一) 液固色谱法	(二) 液液色谱法	(三) 离子交换色谱法	(四) 离子对色谱法	(五) 排阻色谱法	三、色谱数据特点
第三章 药物分析信息的预处理、数学变换及可视化	第一节 信息预处理方法	一、平滑与求导	(一) 平滑	(二) 求导	二、不等性方差噪声的扣除	三、二维数据的背景扣除	四、色谱峰偏移校正	(一) 一维色谱的内标峰校正法	(二) 一维色谱的外标线性回归法	(三) 二维色谱中局部最小二乘校正法	第二节 数学变换	一、导数光谱法	(一) 概述	(二) 原理	(三) 计算方法	(四) 应用实例	二、正交函数法	(一) 原理	(二) p _j 法	(三) P _j 法	(四) 复合多项式法(combined polynomials method)	三、傅里叶变换	(一) 原理	(二) 傅里叶变换在仪器中的应用——FT-IR	四、小波变换
第五章 药物分析信息的处理——数据解析	第六章 模式识别技术简介	第七章 药物分析信息的管理与共享	第二篇 药物分析信息学的应用	第一部分 在分析方法学研究中的应用	第二部分 在中药分析中的应用	第三部分 在化学药品及生物样品分析中的应用	附录参考文献																		

<<药物分析信息学及应用>>

章节摘录

插图：一、分析化学发展趋势——分析化学、分析科学到分析化学信息学（一）从分析化学的定义说起近年来，不同学者从不同角度对分析化学进行了不同的定义，反映了处于深刻变革中的分析化学的现状。

分析化学（analytical chemistry）是研究物质化学组成的分析方法及有关理论的科学，是化学的一个重要分支。

分析化学是研究获取物质化学组成和结构信息的方法学及相关理论和技术的科学。

今天的分析化学已成为一门创造和应用新概念、新原理和仪器的策略来测量化学体系及其组分的学科，一门化学量测科学。

分析化学是一个发展及应用方法、仪器和策略来获得在特定时间与空间中物质的有关组成和性质信息的科学分支。

分析化学是一门仪器装置和量测的科学。

分析化学是关于研究物质的组成、含量、结构和形态等化学信息的分析方法及理论的一门科学，即是一门独立的化学信息科学。

现在看来，对处于深刻变革中的分析化学进行准确的定义是困难的。

因为分析化学本身正在急剧分化，与其他学科产生交叉，呈现多学科融合创新发展的态势，生物学、信息科学和计算机科学的引入，使分析化学进入了一个崭新的境界。

（二）分析化学已经发展到分析科学、分析化学信息学阶段从20世纪70年代末开始直到现在，以计算机应用为主要标志的信息时代来临，驱使分析化学发展到分析科学、分析化学信息学阶段。

分析化学的变革仍在进行中。

信息时代的来临，使分析化学的定义、基础、原理、方法、仪器及技术都发生了根本性的变化。

与经典分析化学密切相关的概念是定性分析系统、重量法、容量法、溶液反应、四大平衡、化学热力学等。

与现代分析化学密切相关的概念是化学计量学、传感器过程控制、自动化分析、专家系统、生物技术和生物过程，以及分析化学微型化所要求的微电子学、显微光学和微工程学等。

<<药物分析信息学及应用>>

编辑推荐

《药物分析信息学及应用》：药物的质量控制离不开现代分析技术的应用。
药物分析丛书按分析方法与手段或药物类别以系列专论形式，分别通过大量的应用实例，深入浅出地向读者介绍现代药物分析方法知识及其最新进展。
本丛书主要供药学、中药学各专业本科生、研究生学习，以开拓视野，更全面地掌握现代药物分析技术；也可供药学及相关领域科研人员参考，以帮助完成药物分析领域科研工作。

<<药物分析信息学及应用>>

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>