第一图书网, tushu007.com

<<药物设计学>>

图书基本信息

书名：<<药物设计学>>

13位ISBN编号：9787117144056

10位ISBN编号：711714405X

出版时间：2007-8

出版时间：人民卫生出版社

作者：徐文方 编

页数：399

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

内容概要

徐文方主编的《药物设计学（第2版）》将原第十章“计算机辅助药物设计”这部分内容分为“基于片段的药物分子设计”、“基于受体结构的药物分子设计”和“基于配体结构的药物分子设计”三章撰写。
另外，由于ADMET在近代药物设计与发现中越来越受到人们的重视，其在创新药物研究与发现中的意义不言而喻，因此，将这部分内容专设为第八章介绍。
其余部分内容没做大的调整。
第一章是药物设计的生命科学基础；二、三章是细胞间的信号转导及内源性生物活性物质的调节机制与有关药物设计；四、五章是基于酶促原理和核酸代谢原理的药物设计；六、七章主要介绍在药物研究与开发中较成熟且实用的前药原理和生物电子等排体原理与方法；九、十章是基于组合化学和化学基因组学原理的药物设计，也是近年来新药研发的前沿领域；最后第十四章是新药开发的基本途径与方法，通过该章的学习，使读者了解新药从发现到开发上市的基本过程。
考虑到新药开发上市是药物设计的终极目标，为了让读者能了解到世界新药研发的基本趋势，尤其是便于从事新药研发的科研人员的立项选题，特将2007～2009年世界上市新药综览专门设为一节并列表介绍。

第一图书网, tushu007.com

<<药物设计学>>

书籍目录

第一章 药物设计的生命科学基础
第一节 药物作用的生物靶点
一、生物靶点的分类
二、生物大分子的结构与功能
第二节 药物与生物大分子靶点的相互作用
一、药物与生物靶点相互作用的化学本质
二、药物与生物靶点相互作用的适配关系
三、药物与靶点相互作用的基本理论
第三节 生物膜与药物的跨膜转运
一、生物膜的基本结构与功能
二、生物膜的物质转运机制与调节
三、影响膜转运的分子药理学
第二章 基于细胞信号转导途径的药物设计
第一节 细胞的信号转导
一、信号与信号转导的物质基础
二、化学信号分子（第一信使）
三、细胞的信号接受系统
四、细胞内信号转导系统
五、第三信使
六、对信号转导系统的药物干预
第二节 基于调节第二信使的药物设计
一、调节cAMP和cGMP信号通路的药物设计
二、调节钙的药物设计
三、调节激酶系统的药物设计
第三节 基于调节第三信使的药物设计
一、维A酸受体和类维A酸受体配基的药物设计
二、过氧化物酶体增殖因子活化受体配体的药物设计
三、维生素D受体配体的药物设计
第三章 基于内源性生物活性肽的药物设计
第一节 肽类化合物的结构与功能
一、肽类化合物的结构特征
二、机体中某些重要的内源性生物活性肽
第二节 类肽的设计原理与方法
一、构型限制性氨基酸的设计
二、肽链骨架的修饰
三、二肽片段拟似物
四、整体分子构象的限定
五、肽二级结构的分子模拟
六、基于内源性活性肽与受体或代谢酶结合后的拓扑结构分子设计
第三节 类肽在药物设计中的应用
一、脑啡肽类似物
二、β—分泌酶抑制剂
三、金属蛋白酶抑制剂
第四章 基于酶促反应原理的药物设计
第一节 酶促反应的基础知识

一、酶促反应理论
二、酶的激活与抑制
第二节 酶抑制剂的设计原理
一、酶抑制剂的发展与分类
二、酶抑制剂的设计原理
第三节 酶抑制剂类药物
一、血管紧张素转化酶抑制剂
二、前列腺素环氧化酶抑制剂
三、HIV逆转录酶抑制剂
四、HMG—CoA还原酶抑制剂
五、神经氨酸酶抑制剂
六、组蛋白去乙酰化酶抑制剂
第五章 基于核酸代谢原理的药物设计
第一节 核酸的生物合成
一、嘌呤核苷酸的合成
二、嘧啶核苷酸的合成
三、核苷二磷酸、核苷三磷酸及脱氧核糖核苷酸
第二节 代谢拮抗类抗肿瘤、抗病毒药物的设计
一、叶酸类抗代谢物
二、嘌呤类抗代谢物
三、嘧啶类抗代谢物
第三节 核苷类抗病毒药物的设计
一、基于核苷糖环修饰的药物
二、基于核苷碱基修饰的药物
三、无环核苷
第四节 反义核酸与小干扰RNA药物的设计
一、反义核酸药物
二、小干扰RNA药物
第六章 基于前药原理的药物设计
第一节 前药设计的基本原理
一、前药的基本概念
二、前药设计的目的与方法
三、前药设计原理的应用
四、生物前体药物
第二节 软药
一、软药的基本概念
二、软药的设计原理及其应用
第三节 孪药
一、孪药的基本概念
二、孪药的分类
三、孪药原理的应用
第四节 靶向前药
一、主动靶向前药设计及其应用
二、被动靶向前药设计及其应用
第七章 基于生物电子等排原理的药物设计
第一节 生物电子等排体的一般概念
一、生物电子等排体的提出与发展

二、生物电子等排体的分类
第二节 生物电子等排原理在药物设计中的应用
一、经典的生物电子等排体的应用
二、非经典的生物电子等排体的应用
第三节 me too药物的开发
一、me too药物的基本概念
二、me t00药物的设计策略
三、近年来上市的me too药物
第八章 类药性及其在药物设计中的应用
第一节 基本概念
一、药物在体内的过程
二、药代动力学及其参数
三、药物毒性
第二节 类药性及其评价方法和应用
一、基于经验判断的类药性评价
二、基于理化性质的类药性评价
三、基于ADMET性质的类药性
第三节 基于类药性的药物设计策略
一、早期开展类药性评价
二、快速类药性评价以及结构性质关系分析
三、并行、循环优化策略
第九章 基于组合化学技术的药物设计
第一节 组合化学的基本原理
一、组合化学的概念
二、组合化学的原理
第二节 组合化学库的构建
一、组合库的设计
二、组合库的构建方法
三、组合库合成技术
四、化合物库生物活性成分结构识别
五、组合库发展趋势
第三节 高通量筛选技术
一、高通量筛选技术的组成
二、计算机虚拟筛选
三、高通量筛选发现药物的基本过程
第十章 基于化学基因组学原理的药物设计
第一节 化学信息学
一、化学信息学的概念
二、化学数据的分析和化学数据库的创建
三、化学信息学与先导化合物的开发
四、化学信息学与先导物的筛选
第二节 生物信息学
一、生物信息学的概念
二、生物信息学的研究目标和任务
第三节 化学基因组学与药物设计
一、化学基因组学发现和确证药物及其靶标
二、化学基因组学的关键技术

三、化学基因组学的技术平台简介
第十一章 基于片段的药物分子设计
第一节 基于片段的分子设计原理
一、基于片段分子设计的发展历程和基本理论
二、基于片段分子设计的研究方法
三、基于片段分子设计的优点
第二节 活性片段的检测技术
一、磁共振技术
二、质谱技术
三、X—射线单晶衍射技术
第三节 基于片段药物设计的应用实例——从片段到先导化合物
一、片段生长法
二、片段连接与融合
三、片段自组装
第十二章 基于受体结构的药物分子设计
第一节 靶蛋白结构的预测
一、蛋白质三维结构预测
二、活性位点的分析方法
第二节 分子对接与虚拟筛选
一、分子对接
二、计算机虚拟筛选技术
第三节 全新药物设计
第十三章 基于配体结构的药物分子设计
第一节 定量构效关系（QSAR）
一、二维定量构效关系
二、3D—QSAR的研究
第二节 药效团模型及其应用
第十四章 新药开发的基本途径与方法
第一节 药物作用靶点的发现
一、人类功能基因组学的研究
二、与重大疾病相关基因的发现与表达
第二节 先导化合物的发掘与结构优化
一、先导化合物的发现
二、先导化合物的结构优化
第三节 临床候选药物的研究与开发
一、临床前体内外药效学评价
二、临床前安全性评价
三、临床前药学研究
四、药物临床研究
第四节 2007—2009年世界上市新药综览
中文索引
英文索引

第一图书网, tushu007.com

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