第一图书网, tushu007.com

<<计算机辅助药物设计>>

图书基本信息

书名：<<计算机辅助药物设计>>

13位ISBN编号：9787561161043

10位ISBN编号：7561161042

出版时间：2011-4

出版时间：大连理工大学

作者：《新世纪应用型高等教材化工类课程规划教材·计算机辅助药物设计:基本方法原理概要与实践详解》编写组

页数：216

字数：325000

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

本书系作者在近年来为同济大学本科生开设的“计算机辅助药物设计”课程所用讲义基础上，经扩展、补充和修改编写而成。

本书内容涵盖了“计算机辅助药物设计”七大研究方向———虚拟小分子生成、大分子结构预测、定量构效关系、药效团模型、分子对接、全新药物设计和动态模拟（分子动力学/随机动力学/蒙特卡洛），并且第一次系统地对这些技术的操作进行了讲解。
本书共有九章，第一章对“计算机辅助药物设计”和配合本书实例讲解的国际著名软件MOE的全貌进行了介绍;第二章到第八章依次对“计算机辅助药物设计”的七大研究方向进行了理论和实践操作的系统介绍;第九章对MOE中三个特色模块进行了单独介绍。
另外，每章还设有一个“知识拓展”，该部分主要是介绍一些更为前沿或热门的知识，希望能为读者的相关研究或深入学习起到抛砖引玉的效果。

另外，为方便使用，凡本书中提及的输入文件、中间结果和最后结果等附件，读者均可到www.cadd-moe.org网站中按章节免费获取。

本书是国内第一本专门为本科生撰写的《计算机辅助药物设计》教材，此外，本书也将是工业界相关人员和研究生的一本非常合适的参考书。

作者简介

朱瑞新博士任教于同济大学生命科学与技术学院。
其主要科研方向有：

书籍目录

第一章“计算机辅助药物设计”与MOE概貌
一、导言
二、“计算机辅助药物设计”概貌
三、MOE概貌
四、知识拓展
五、本章小结
六、复习思考题
第二章 虚拟组合库设计
一、虚拟组合库设计的运用
二、组合化学与虚拟组合库设计
三、虚拟组合库设计方法原理
四、虚拟组合库设计的操作要领
五、知识拓展
六、本章小结
七、复习思考题
第三章 生物大分子结构预测
一、生物大分子结构预测的运用
二、生物大分子结构测定与生物大分子结构预测
三、生物大分子结构预测的方法原理
四、同源模建的操作要领
五、知识拓展
六、本章小结
七、复习思考题
第四章 定量构效关系
一、定量构效关系的运用
二、构效关系与定量构效关系
三、定量构效关系的方法原理
四、定量构效关系的操作要领
五、知识拓展
六、本章小结
七、复习思考题
第五章 药效团模型
一、药效团模型的运用
二、活性特征基团和药效团
三、药效团模型的方法原理
四、药效团模型的操作要领
五、知识拓展
六、本章小结
七、复习思考题
第六章 分子对接
一、分子对接的运用
二、分子（生化）水平的高通量筛选技术和分子对接
三、分子对接的方法原理
四、分子对接的操作要领
五、知识拓展

六、本章小结
七、复习思考题
第七章 全新药物设计
一、全新药物设计的运用
二、片段组学（基于片段的药物设计）和全新药物设计
三、全新药物设计的方法原理
四、全新药物设计的操作要领
五、知识拓展
六、本章小结
七、复习思考题
第八章 分子动力学、随机动力学和蒙特卡洛
一、分子动力学、随机动力学和蒙特卡洛的运用
二、体系全部性质测定和分子动力学/随机动力学/蒙特卡洛
三、分子动力学、随机动力学和蒙特卡洛的方法原理
四、分子动力学、随机动力学和蒙特卡洛的操作要领
五、知识拓展
六、本章小结
七、复习思考题
第九章 MOE中其他实用模块
一、蛋白 -配体相互作用指纹
二、大分子质子化
三、抗体同源模建
四、知识拓展
五、本章小结
六、复习思考题
参考文献

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