

## <<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>

## <<计算机辅助药物设计>>

### 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](http://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。

<<计算机辅助药物设计>>

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。  
其主要研究方向有：

## <<计算机辅助药物设计>>

### 书籍目录

#### 第一章 “计算机辅助药物设计”与MOE概貌

- 一、 引言
- 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

## <<计算机辅助药物设计>>

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

<<计算机辅助药物设计>>

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>