

<<类药性质>>

图书基本信息

书名：<<类药性质>>

13位ISBN编号：9787030289407

10位ISBN编号：7030289404

出版时间：2011-1

出版时间：科学

作者：（美）克恩斯，邱力

页数：496

译者：钟大放

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>

<<类药性质>>

内容概要

一个成功的药物是生物学活性和类药性质的组合。

这本书解释了药物发现过程以及基于性质的设计如何能够提高化合物到上市药物的成功率。

作者从药物发现科学家的角度写作，为药物化学家、ADME科学家(从事药物的吸收、分布、代谢和排泄研究)以及本领域的高年级学生提供了一本实用指南。

本书可以作为药物发现科学家的教材，也可以作为通常使用的参考书。

溶解度、渗透性和代谢等类药性质是考察药物在体内行为的基本决定因素。

书中使用了最少的数学公式讨论药动学概念，重点是它们在药物发现项目中的实际应用。

首先分章讨论每种主要性质，包括基本理论、应用和修饰化学结构以改善性质的案例研究。这将使读者理解性质，并学习使用性质的有效方式。

接下来的各章描述测量性质的方法，包括高通量方法、诊断性方法和深入的方法。

最后几章提供了将类药性质整合到药物发现过程的策略。

每一章概括出关键的学习目标，并提供习题和答案，以检验读者是否清楚地理解了相关内容。

对需要更多信息的读者，书中列出了进一步阅读的材料清单。

<<类药性质>>

书籍目录

译者序序第一部分 介绍性概念 第1章 引言 第2章 良好类药性质的优势 2.1 类药性质是药物发现的组成部分之一 2.2 在发现阶段转变为注重化合物性质 2.3 发现阶段的性质获取 2.4 发现阶段的类药性质优化 第3章 生命系统中药物暴露的屏障 3.1 屏障简介 3.2 给药 3.3 口腔和胃的屏障 3.4 胃肠道屏障 3.5 血液中的屏障 3.6 肝中的屏障 3.7 肾中的屏障 3.8 血液-组织屏障 3.9 组织分布 3.10 手性对屏障和性质的影响 3.11 体内屏障概述第二部分 物理化学性质 第4章 从结构快速描述特征的规则 4.1 Lipinski规则 4.2 Veber规则 4.3 其他规则 4.4 应用相关规则评估化合物 第5章 亲脂性 5.1 亲脂性的基本原理 5.2 亲脂性的影响 5.3 亲脂性案例研究及结构修饰 第6章 pK 6.1 pK 的基本原理 6.2 pK 的影响 6.3 pK 案例研究 6.4 针对pK 的结构修饰策略 第7章 溶解度 7.1 溶解度的基本原理 7.2 溶解度效应 7.3 生理学因素对溶解度和吸收的影响 7.4 改善溶解度的结构修饰策略 7.5 改善溶出速度的策略 7.6 盐型 第8章 渗透性 8.1 渗透性的基本原理 8.2 渗透性的影响 8.3 改善渗透性的结构修饰策略第三部分 处置、代谢和安全性 第9章 转运体 9.1 转运体的基本原理 9.2 转运体的作用 9.3 外排转运体 9.4 摄取转运体 第10章 血脑屏障 10.1 血脑屏障的基本原理 10.2 脑通透性的作用 10.3 结构与血脑屏障通透性的关系 10.4 改善化合物脑通透性的结构修饰策略 第11章 代谢稳定性 11.1 代谢稳定性的基本原理 11.2 代谢稳定性的影响 11.3 针对一相代谢稳定性的结构修饰策略 11.4 针对二相代谢稳定性的结构修饰策略 11.5 代谢稳定性数据的应用 11.6 手性对代谢稳定性的影响 11.7 CYP同工酶的底物专属性 第12章 血浆稳定性 12.1 血浆稳定性的基本原理 12.2 血浆稳定性的影响 12.3 提高血浆稳定性的结构修饰策略 12.4 血浆稳定性数据的应用 第13章 溶液稳定性 13.1 溶液稳定性的基本原理 13.2 溶液不稳定性的影响 13.3 提高溶液稳定性的结构修饰策略 13.4 溶液稳定性数据的应用 第14章 血浆蛋白结合 14.1 血浆蛋白结合的基本原理 14.2 血浆蛋白结合的影响 14.3 血浆蛋白结合案例研究 14.4 针对血浆蛋白结合的结构修饰策略 14.5 发现阶段的血浆蛋白结合对策 14.6 红细胞结合 第15章 细胞色素P450的抑制 15.1 CYP抑制的基本原理 15.2 CYP抑制的影响 15.3 CYP抑制案例研究 15.4 降低CYP抑制的结构修饰策略 15.5 可逆和不可逆的CYP抑制 15.6 其他类型的药物-药物相互作用问题 第16章 hERG阻断 16.1 hERG的基本原理 16.2 hERG阻断效应 16.3 hERG阻断的结构-活性关系 16.4 针对hERG的结构修饰策略 第17章 毒性 17.1 毒性的基本原理 17.2 毒性案例研究 17.3 改善安全性的结构修饰策略 第18章 鉴别与纯度 18.1 鉴别和纯度的基本原理 18.2 鉴别和纯度的影响 18.3 鉴别和纯度的应用 第19章 药动学 19.1 药动学简介 19.2 药动学参数 19.3 血浆蛋白结合对药动学参数的影响 19.4 组织摄取 19.5 药物发现中药动学数据的应用 第20章 类先导化合物 20.1 类先导物性质 20.2 模板保留 20.3 分类 20.4 基于片段的筛选 20.5 类先导化合物结论 第21章 将类药性质整合到药物发现中的策略 21.1 早期评估类药性质 21.2 快速评估所有新化合物的类药性质 21.3 建立结构-性质关系 21.4 迭代平行优化 21.5 获得直接与结构相关的性质 21.6 应用性质数据改进生物学实验 21.7 用个性化试验回答特殊项目问题 21.8 根据单一性质判断化合物在复杂体系中的不佳表现第四部分 研究方法 第22章 描述类药性质的方法：一般概念 22.1 应当快速获得性质数据 22.2 使用适当的测定条件 22.3 评估测试的成本-收益比 22.4 选择关键性质的综合体来进行评估 22.5 使用成熟的试验方法 第23章 亲脂性研究方法 23.1 计算机预测亲脂性方法 23.2 亲脂性实验方法 23.3 深入的亲脂性测定方法 第24章 pK 研究方法 24.1 计算机软件预测pK 方法 24.2 pK 实验方法 24.3 深入探究pK 的方法：pH计量法 第25章 溶解度研究方法 25.1 文献中溶解度计算方法 25.2 用于溶解度计算的商业软件 25.3 动力学溶解度测定方法 25.4 热力学溶解度测定方法 第26章 渗透性研究方法 26.1 渗透性的计算机模拟方法 26.2 体外渗透性测定方法 26.3 深入研究渗透性的方法 第27章 转运体研究方法 27.1 计算机预测转运体方法 27.2 体外转运体实验方法 27.3 用于转运体的体内实验方法 第28章 血脑屏障研究方法 28.1 用于血脑屏障的计算机预测方法 28.2 血脑屏障体外实验方法 28.3 血脑屏障的体内研究方法 28.4 脑通透性的评估策略 第29章 代谢稳定性研究方法 29.1 计算机预测代谢稳定性方法 29.2 体外代谢稳定性试验方法 第30章 血浆稳定性研究方法 第31章 溶液稳定性研究方法 31.1 溶液稳定性测定的一般方法 31.2 生物学测定介质中溶液稳定性研究方法 31.3 用于不同pH溶液的稳定性研究方法 31.4 用于模拟胃肠液的稳定性研究方法 31.5 鉴定溶液稳定性试验中的降解产物 31.6 深入研究药物发现晚

<<类药性质>>

期化合物溶液稳定性的方法 第32章 CYP酶抑制研究方法 32.1 CYP抑制的计算机预测方法 32.2 体外CYP抑制试验方法 32.3 CYP抑制评估策略 第33章 血浆蛋白结合研究方法 33.1 计算机预测血浆蛋白结合方法 33.2 体外血浆蛋白结合方法 33.3 血红细胞结合 第34章 hERG研究方法 34.1 计算机预测hERG方法 34.2 体外hERG方法 34.3 体内hERG方法 第35章 毒性研究方法 35.1 计算机模拟毒性预测方法 35.2 体外毒性试验 35.3 体内毒性 第36章 鉴别与纯度研究方法 36.1 鉴别和纯度的检测标准 36.2 用于鉴别和纯度分析的样品 36.3 鉴别和纯度检测方法的要求 36.4 关于鉴别与纯度研究方法的建议 36.5 阴性鉴定结果的后续操作 36.6 方法范例 36.7 案例研究方法 第37章 药动学研究方法 37.1 药动学给药 37.2 药动学采样和样品处理 37.3 仪器分析 37.4 药动学数据举例 37.5 组织摄取 第五部分 特殊主题 第38章 诊断与改善药动学性能 38.1 根据药动学性能诊断受限性质 38.2 阐释异常药动学性能的研究案例 第39章 前药 39.1 前药用于增加溶解度 39.2 前药用于增加被动渗透 39.3 转运体介导的前药用于增加肠吸收 39.4 前药用于降低代谢 39.5 前药作用于特定靶组织 39.6 软药 第40章 化合物性质对生物学测定的影响 40.1 化合物在DMSO中不溶性的影响 40.2 解决化合物在DMSO中的不溶性问题 40.3 水缓冲液中不溶性化合物的影响 40.4 解决化合物在水缓冲液中的溶解度问题 第41章 制剂 41.1 给药途径 41.2 药效强度决定给药方式 41.3 制剂策略 41.4 药物发现阶段制剂的实用指南附录一 各章习题答案附录二 一般性参考文献附录三 名词解释

<<类药性质>>

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>