

## <<药物合成路线设计>>

### 图书基本信息

书名：<<药物合成路线设计>>

13位ISBN编号：9787122042835

10位ISBN编号：7122042839

出版时间：2009-4

出版时间：化学工业出版社

作者：李旭琴 编

页数：239

字数：307000

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>

## &lt;&lt;药物合成路线设计&gt;&gt;

## 前言

药物合成路线设计所涉及的范围非常广泛。

除了药物化学、药物设计学、有机合成化学的基本理论外，实验室合成、工业生产工艺的各实践环节也是必须考虑的。

近年来合成药物的新例子、新方法、新策略不断问世，充实了药物设计与合成研究的内容。

本书结合目前已上市或正在临床研究的药物实例，从药物化学的基本概念、原理出发，重点讨论了各类药物的设计原则与合成方法。

本书以新药开发中的理论与实践相结合为特色，在药物的分类上，不同于以往的按照药物的药效进行分类的方法，而按照药物的不同化学类型来进行分类，这样有利于从化学的角度来理解药物设计方法，特别是有利于对合成路线设计的理解。

本书是“药学实验室技术系列”中的一个分册，在结构安排上分为概述、各论、药物合成工艺的设计三部分，共9章。

为了帮助读者理解各类药物设计的原则与方法，本书的第1部分（包括第1章、第2章）主要叙述了药物化学、药物设计学及合成中的一些基本理论知识，首先介绍了药物化学的定义、研究内容，并用例证来回顾药物化学发展的不同阶段发展过程。

然后，介绍药物设计学的定义、一般设计原理以及常用的设计学方法。

在这一部分中，我们着重介绍了计算机辅助药物设计学与组合化学的内容，并且还简单介绍了近年来提出来的类药5原则。

为后面章节叙述的设计方法提供背景材料和知识。

第2部分各论（包括第3~7章）按照药物的化学类型不同，以目前上市或正在临床研究的药物为例，分类阐述了药物的设计方法以及合成路线的设计。

其中第3章，肽类药物列举了环肽类似物、京都啡肽、缩宫素、肽胃泌素等实例。

## <<药物合成路线设计>>

### 内容概要

本书为“药学实验室技术系列”中的分册之一，是关于药物设计与合成的一本实用性很强的专业书。全书共9章，兼顾基础性与系统性，并及时反映近期研究成果。

本书主要以药物设计的原理为理论基础，以目前上市或正在临床研究的药物为例，按照药物的不同化学类型分类来说明药物设计与合成的方法。

本书可作为各高等院校相关专业学生的教学参考用书，也可供从事相关专业的生产、开发、科研技术人员阅读、参考。

## &lt;&lt;药物合成路线设计&gt;&gt;

## 书籍目录

第1部分 概述	第1章 绪论	1.1 药物化学和药物设计学定义	1.2 药物化学的发展	参考文献
第2章 药物设计原理	2.1 药物设计的基本原理	2.1.1 前药设计	2.1.2 软药设计	2.1.3 生物电子等排
	2.1.4 代谢拮抗	2.1.5 构效关系以及定量构效关系	2.1.6 Lipinski五规则	
	2.2 药物设计常用技术	2.2.1 计算机辅助药物设计在新药研究中的应用	2.2.2 组合化学在新药研究中的应用	参考文献第2部分 各论
	2.2.3 高通量筛选技术在新药研究中的应用			第3章 多肽药物的合成路线设计
	3.1 多肽药物的结构特征及分类	3.2 肽类药物设计的原则及方法		
	3.2.1 多肽合成基本原则	3.2.2 氨基酸的保护方法	3.3 肽键形成的方法	3.3.1 缩合剂法
	3.3.2 混合酸酐法	3.3.3 活化酯法	3.3.4 叠氮法	3.3.5 N-羧基内酰胺(NCA)法
	3.4 多肽药物合成路线设计	3.4.1 Gly-Lys-Gly的合成	3.4.2 环肽的合成	3.4.3 京都啡肽缀合物的合成
	3.4.4 缩宫素的合成	3.4.5 17肽胃泌素的合成	参考文献	第4章 核酸类药物的合成路线设计
	4.1 核酸化学简介	4.2 核苷的合成	4.2.1 核苷的合成方法	4.2.2 阿巴卡韦的合成
	4.2.3 阿德福韦酯的合成	4.2.4 阿昔洛韦的合成及改进	4.2.5 恩曲他滨的合成	4.2.6 拉米夫定及其类似物的合成
	4.2.7 齐多夫定的合成方法及改进	4.2.8 去羟肌苷的化学合成路线	4.2.9 司他夫定的合成	4.2.10 盐酸吉西他滨的合成
	4.3 反义核酸药物的合成和纯化	4.3.1 ASODN药物的合成	4.3.2 ASODN药物的纯化	4.3.3 小结
	参考文献	第5章 糖类药物的合成路线设计	5.1 引言	5.2 糖类的合成
	5.2.1 糖苷键的合成	5.2.2 糖类的合成策略	5.2.3 糖类的组合合成	5.2.4 糖类的酶促合成
	5.2.5 糖肽的合成	5.3 糖类药物的合成	5.3.1 糖类药物的概念	5.3.2 糖类药物的特点
	5.3.3 糖类药物的分类	5.3.4 糖类药物合成举例	参考文献	第6章 杂环类药物的合成路线设计
	第7章 天然产物的合成路线设计	第3部分 药物合成工艺的设计	第8章 药物合成工艺设计的原则	第9章 药物合成工艺的实例分析

## &lt;&lt;药物合成路线设计&gt;&gt;

## 章节摘录

插图：第1章 绪论1.1 药物化学和药物设计学定义药物（drug）是人类用于预防、治疗和诊断疾病，或者是调节人体功能、提高生活质量、保持身体健康的特殊化学物质。

药物化学（medicinal chemistry）是合成化学药物，发明和发现新药，阐明药物的结构和性质，研究药物分子与机体生物大分子相互作用规律，总结药物构效关系，寻求新药途径和方法的一门综合学科。

药物化学是药物学中一门强大的分支学科。

药物化学研究的范围包含着化学和生物学的内容。

药物化学研究药物的化学结构特点、理化性质、稳定性，药物进入机体后的生物转化、生物效应、毒副作用，同时研究药物在机体中的作用靶点、与靶点的作用方式和构效关系等。

药物设计（drug design）是运用化学手段，构建具有生物学活性的新化学实体（new chemical entities, NCE）的过程。

药物设计有很多方法和途径，一般分为两个阶段：先导化合物的发现（lead discovery）和先导化合物的优化（lead optimization），这是两个相继进行，又相互关联、渗透、相辅相成的过程。

先导化合物的发现为寻找最佳化合物提供了物质基础，先导化合物的优化是先导化合物的发展和深入。

新药设计的思想和方法推动了近现代新药研究工作的发展。

合理的药物设计大大减少了化合物合成和筛选的盲目性，提高了新药发现的命中率。

先导化合物（lead compound）是可以用于结构改造，进而能够获得预期生物学活性的化合物。

先导化合物并不是可以临床应用的优良药物，可能具有药理学活性不高、与作用靶点结合特异性低、药代动力学性质不合理或者毒副作用较大等缺点。

虽然不能作为药用，但是为先导化合物的优化提供了物质结构基础。

## &lt;&lt;药物合成路线设计&gt;&gt;

## 后记

药物合成路线设计所涉及的范围非常广泛。

除了药物化学、药物设计学、有机合成化学的基本理论外，实验室合成、工业生产工艺的各实践环节也是必须考虑的。

近年来合成药物的新例子、新方法、新策略不断问世，充实了药物设计与合成研究的内容。

本书结合目前已上市或正在临床研究的药物实例，从药物化学的基本概念、原理出发，重点讨论了各类药物的设计原则与合成方法。

本书以新药开发中的理论与实践相结合为特色，在药物的分类上，不同于以往的按照药物的药效进行分类的方法，而按照药物的不同化学类型来进行分类，这样有利于从化学的角度来理解药物设计方法，特别是有利于对合成路线设计的理解。

本书是“药学实验室技术系列”中的一个分册，在结构安排上分为概述、各论、药物合成工艺的设计三部分，共9章。

为了帮助读者理解各类药物设计的原则与方法，本书的第1部分(包括第1章、第2章)主要叙述了药物化学、药物设计学及合成中的一些基本理论知识，首先介绍了药物化学的定义、研究内容，并用例证来回顾药物化学发展的不同阶段发展过程。

然后，介绍药物设计学的定义、一般设计原理以及常用的设计学方法。

在这一部分中，我们着重介绍了计算机辅助药物设计学与组合化学的内容，并且还简单介绍了近年来提出来的类药5原则。

为后面章节叙述的设计方法提供背景材料和知识。

第2部分各论(包括第3~7章)按照药物的化学类型不同，以目前上市或正在临床研究的药物为例，分类阐述了药物的设计方法以及合成路线的设计。

其中第3章，肽类药物列举了环肽类似物、京都啡肽、缩宫素、肽胃泌素等实例。

第4章，主要介绍核酸类药物的类型、应用、核酸类药物设计的原则与方法、核酸类药物的合成路线设计。

除此之外，还介绍了反义核酸药物的设计与合成。

由于许多重要的生命活动过程都有糖类化合物的参与，糖类药物是副作用相对较小的药物，第5章通过介绍Topiramate、Voglibose、Miglitol、Zanamivir等糖类药物，说明了糖类药物的合成路线设计。

含有杂环结构的化合物数量几乎占已知有机化合物的三分之一，由于其“似药性”或者“似先导物”以及表现出来的多重生物活性，杂环类药物已成为药物化学研究的最主要领域之一。

因此，第6章根据结构类型不同，分类介绍了杂环药物的合成路线设计。

需要特别说明的是第7章天然产物的结构改造与合成。

由于天然产物特有的化学结构复杂性和生物活性多样性，不仅直接激发了有机合成化学的发展，也为研发创新药物提供了广阔的天地。

天然药物的合成研究非常活跃，从1981~2002年间上市的小分子药物，有一半以上是来自天然产物和受天然产物结构的启发而进行的合成工作。

对于这一部分的内容我们用大量的已上市和正在临床实验的例子来说明天然产物合成策略，及时反映了近期研究成果，并在这一章用反合成分析原理来介绍天然产物合成的路线设计。

另外由于药物工业化生产的特殊性，与前叙的实验室合成方法相比，更注重生产成本和环保的要求，因此，第3部分(包括第8章、第9章)主要是从工业生产的角度，将绿色化学、原子经济性等原理与实例相结合，介绍药物合成工艺路线设计的原则与方法。

本书由北京科技大学应用学院李旭琴担任主编。

第1章、第2章、第5章由中国医学科学院药物研究所杨天明完成，第3章编写者为北京大学药学院代文兵，第4章编写者为北京大学药学院陈哲，第6章编写者为赤峰学院附属医院药剂科孙朝晖，第7章编写者为李旭琴，第8章、第9章编写者为杨天明、李旭琴。

本书的完成离不开编辑的辛勤工作，向她们表示感谢。

本书编写人员较多，不同编写人员在文字表述和对相关内容理解认识方面存在差异，对此，我们充分

<<药物合成路线设计>>

尊重各编写人员意见，相关内容予以保留。  
由于编者水平有限，书中疏漏之处在所难免，敬请读者批评指正。

## <<药物合成路线设计>>

### 编辑推荐

《药物合成路线设计》结合目前已上市或正在临床研究的药物实例，从药物化学的基本概念、原理出发，重点讨论了各类药物的设计原则与合成方法。



<<药物合成路线设计>>

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>