

<<手性化合物的构效关系研究>>

图书基本信息

书名：<<手性化合物的构效关系研究>>

13位ISBN编号：9787312028960

10位ISBN编号：7312028969

出版时间：2011-8

出版时间：中国科学技术大学出版社

作者：许禄，张庆友 著

页数：347

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>

<<手性化合物的构效关系研究>>

内容概要

在作者许禄、张庆友自身研究工作的基础上,《手性化合物的构效关系研究》系统地介绍了手性化合物构效关系研究的主要方法:基于CIP规则的二维拓扑指数手性扩展、已有某些拓扑的手性扩展及应用、构象独立及构象依赖手性拓扑指数、基于物化参数的手性指数、化合物的形状比较及二维拓扑指数(第4章至第9章)。

作为铺垫,第1章至第3章分别介绍了图论的基本概念、有机化合物的空间异构及手性化合物的几何定量。

第10章和第11章分别介绍了化合物二维及三维异构体的穷举生成算法,这种算法可用于构效关系研究中样本集的计算机衍生。

《手性化合物的构效关系研究》可供化学、生物化学及药物化学领域的广大科技工作者参考。

<<手性化合物的构效关系研究>>

作者简介

许禄，生于1941年，1965年毕业于中国科学技术大学近代化学系，遂供职于中国科学院长春应用化学研究所。

1979年获洪堡基金会奖学金赴德国进行深造，并于1988年和1993年先后赴日本和美国进行科学研究。获国家科技进步二等奖、中国科学院科技进步一等奖等8项奖励；出版专著6部，发表论文230余篇。现为研究员、博士生导师、吉林省“拔尖人才”，享受国务院政府特殊津贴。

张庆友，生于1972年，1994年和1997年于吉林大学化学系分别获学士学位和硕士学位；2003年毕业于中国科学院长春应用化学研究所，师从许禄研究员，获得博士学位；2004年到2007年在葡萄牙从事博士后研究，现供职于河南大学化学化工学院。

主要研究方向为化学信息学。

<<手性化合物的构效关系研究>>

书籍目录

总序

前言

第1章 图论的基本概念

1.1 图的定义

1.2 邻接及关联

1.3 图的同构

1.4 步程、行迹、路径、距离及价

1.5 子图

1.6 正规图

1.7 树

1.8 平面图

1.9 化学图

1.10 图论矩阵

参考文献

第2章 立体化学和手性分子

2.1 引言

2.2 顺反异构

2.3 顺反异构体性质上的差异

2.4 对映异构

2.5 对映异构体的命名

2.6 对映异构体的光学性质

2.7 内消旋异构体和外消旋异构体

2.8 不对称合成

参考文献

第3章 手性的几何学定量

3.1 手性的几何度量

3.2 最手性三角的确定

3.3 结果的比较

参考文献

第4章 基于CIP规则的手性拓扑指数

4.1 引言

4.2 手性校正因子

4.3 手性指数的对称性

4.4 ZAGREB类指数的手性扩展

4.5 分子连接性指数的手性扩展

4.6 拓扑电荷指数的手性扩展

4.7 手性扩展连接指数和手性全连接指数

4.8 相对基团连接手性指数

参考文献

第5章 手性分子拓扑指数

5.1 引言

5.2 手性Am指数和手性分子连接性指数

5.3 手性指数的矩阵法

5.4 手性乘积指数的进一步研究

参考文献

<<手性化合物的构效关系研究>>

第6章 构象独立手性指数

- 6.1 引言
- 6.2 径向分布函数
- 6.3 构象独立手性指数
- 6.4 应用实例

参考文献

第7章 构象依赖手性指数

- 7.1 引言
- 7.2 构象依赖手性指数
- 7.3 两种方法的应用实例
- 7.4 手性指数和分子结构
- 7.5 原子构象依赖手性指数

参考文献

第8章 手性中心的物化描述

- 8.1 引言
- 8.2 物化手性描述符
- 8.3 物化手性描述符的应用
- 8.4 非基于CIP规则的手性拓扑电荷指数
- 8.5 核磁共振波谱化学位移预测

参考文献

第9章 二维分子形状和手性程度

- 9.1 引言
- 9.2 分子边界
- 9.3 苯环型化合物的形状编码
- 9.4 二维手性的左右分类
- 9.5 较大手性苯环型化合物的形状
- 9.6 基于二进制编码的手性程度
- 9.7 偏序
- 9.8 苯环型化合物对任意二维形状的描述
- 9.9 二维苯环型化合物的手性指数

参考文献

第10章 拓扑结构的穷举生成

- 10.1 引言
- 10.2 结构基元和结构片断
- 10.3 从分子式到结构片断集
- 10.4 整体结构穷举生成算法

参考文献

第11章 立体结构的穷举生成

- 11.1 引言
- 11.2 立体中心的查找
- 11.3 图的自同构群算法
- 11.4 立体异构体的穷举生成
- 11.5 结论

参考文献

附录 主成分分析方法

附录 偏最小二乘算法

附录 反向传输人工神经网络法

<<手性化合物的构效关系研究>>

附录 相向传输人工神经网络法

<<手性化合物的构效关系研究>>

章节摘录

版权页：插图：需要强调的是， S_{ijkl} 是根据手性中心进行定义的，而对于没有手性中心的手性分子则不能做出判断，由此限制了构象独立手性指数的应用范围。

另外，考虑到杂原子手性的复杂性，构象独立手性指数忽略了杂原子作为手性中心的情况，即只能用于手性中心为碳原子的分子。

尽管有这些不足，但以碳原子为手性中心的分子是最常见的手性分子，所以构象独立手性指数依然有很大的应用范围。

而构象依赖手性指数与构象独立手性指数不同，该指数不依赖于手性中心，因此更为通用。

构象依赖手性指数的介绍见第7章。

每一四原子 i, j, k 和 l 的组合可以计算得到一对 e_{ijkl} 和 S_{ijkl} ，如果 a, b, c 和 d 基团分别有 n_i, n_j, n_k 和 n_l 个原子，且没有原子同时属于两个及以上的基团，则共有 $N=n_i \times n_j \times n_k \times n_l$ 个组合，可以分别得到 N 对 e_{ijkl} 和 S_{ijkl} ，然而，根据图6.2可知，有时会出现一个原子同时出现在两个或者两个以上基团的情况（图6.2中的原子6同时属于两个基团），则在计算 e_{ijkl} 和 S_{ijkl} 时忽略该组合，也就是说， i, j, k 和任何两个原子之间不能相同。

同样以图6.2为例来列举一个手性分子中的所有四原子组合，为了便于说明，在本例的计算中，仅考虑非氢原子（和手性中心键连的氢原子除外）。

如果没有原子同时在两个基团中出现，则应该有 $N=3 \times 3 \times 1 \times 1=9$ ，共9种组合，但原子6同时在两个基团中，排除一种组合，即共8种。

根据规则，由四个基团中任取一个原子进行组合。

从结构图可见，碳原子7和氢原子8分别是所在基团的唯一原子，所以必然出现在组合中，令其分别为 e_{ijkl} 中的原子 k 和 l 。

令 i 代表原子1，或2，或6；令 j 代表原子4，或5，或6。

则8种 i, j, k 和 l 的组合为： $(1, 4, 7, 8)$ ， $(1, 5, 7, 8)$ ， $(1, 6, 7, 8)$ ， $(2, 4, 7, 8)$ ， $(2, 5, 7, 8)$ ， $(2, 6, 7, 8)$ ， $(6, 4, 7, 8)$ ， $(6, 5, 7, 8)$ 。

以 n_i, n_j, n_k 和 n_l ，分别表示与手性中心相连的四个基团的原子数，将计算所有四原子组合所得 e_{ijkl} 和 S_{ijkl} 代入式(6.3)，即可得到描述该手性中心的构象独立手性的函数 $f_{CICC}(x)$ 。

<<手性化合物的构效关系研究>>

编辑推荐

《手性化合物的构效关系研究》可供化学、生物化学及药物化学领域的广大科技工作者参考。

<<手性化合物的构效关系研究>>

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>