

## <<分子模拟与计算机辅助药物设计>>

### 图书基本信息

书名：<<分子模拟与计算机辅助药物设计>>

13位ISBN编号：9787313079800

10位ISBN编号：731307980X

出版时间：2012-3

出版时间：上海交通大学出版社

作者：魏冬青 等编著

页数：270

字数：320000

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>

## <<分子模拟与计算机辅助药物设计>>

### 内容概要

这本《分子模拟与计算机辅助药物设计(精)》由魏冬青、顾若需、连鹏、张涛、王莹编著。基于统计力学的分子模拟算法是连接经典或量子分子模型与生物化学实验观察测量的桥梁之一。计算机辅助药物设计就是利用已知配体—受体作用的生物化学信息和对其物理化学特性的认识，在计算机辅助下研究和优化新配体(假定中候选药物分子)的过程。

《分子模拟与计算机辅助药物设计(精)》详细介绍了分子模拟的数学、生物学、物理和化学基础，分子模拟的算法，蛋白质结构的模拟，药物设计的基本方法和信息系统等内容，并列举了不少药物设计的实例。

本书可作为高等院校相关专业教材，也可作为相关领域研究人员的参考书。

# <<分子模拟与计算机辅助药物设计>>

## 书籍目录

### 第1章 分子模拟的数学基础

#### 1.1 级数

#### 1.2 积分的概念和方法

### 第2章 分子模拟的生物信息学基础

#### 2.1 序列比对

#### 2.2 序列分析

#### 2.3 蛋白质结构预测

#### 2.4 基因芯片技术

#### 2.5 各种数据库和网络资源

#### 参考文献

### 第3章 分子模拟的物理和化学基础

#### 3.1 量子化学计算的基本原理

#### 3.2 密度泛函理论(Density Functional Theory, DFT)

#### 3.3 原子间与分子间作用力

#### 3.4 分子力场

#### 3.5 几种常见的分子力场

#### 3.6 溶剂介电质模型

#### 3.7 多体问题和有效成对势能

#### 参考文献

### 第4章 分子模拟基本算法

#### 4.1 统计力学基础

#### 4.2 Monte Carlo模拟

#### 4.3 分子模拟

#### 4.4 从头算分子动力学(Ab Initio Molecular Dynamics, AIMD)简介

#### 4.5 QM/MM简介

#### 4.6 能量优化算法与过渡态求解

#### 参考文献

### 第5章 蛋白质结构模拟

#### 5.1 蛋白质结构的预测

#### 5.2 反相折叠方法

#### 5.3 从头折叠法

#### 5.4 常用的网站

#### 5.5 常用软件

#### 参考文献

### 第6章 药物设计的基本方法

#### 6.1 早期的探索

#### 6.2 二维定量构效关系

#### 6.3 三维定量构效关系

#### 6.4 更高维定量构效关系

#### 6.5 数据统计分析方法

### 第7章 药物设计的信息系统

#### 7.1 化学信息系统

#### 7.2 组合化学信息管理系统

#### 7.3 生物信息数据库和软件

#### 7.4 数据库搜索技术

## <<分子模拟与计算机辅助药物设计>>

### 参考文献

#### 第8章 计算机辅助药物设计应用实例

##### 8.1 抗SARS的药物设计

##### 8.2 HIV蛋白酶抑制剂的筛选

##### 8.3 流感病毒神经氨酸酶抑制剂的研究

##### 8.4 定量构效关系与噁唑烷酮抗菌药物的设计

##### 8.5 抗老年痴呆症的药物筛选

### 参考文献

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>