

《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

出版社：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

版权说明：本站所提供下载的PDF图书仅提供预览和简介以及在线试读，请支持正版图书。

更多资源请访问：www.tushu000.com

《计算机辅助药物设计》

内容概要

计算机辅助药物设计：基本方法原理概要与实践详解，ISBN：9787561161043，作者：朱瑞新 著

《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、导言 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、药效团模型的应用 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 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》

精彩短评

- 1、可以看做是moe的操作手册吧。讲的不深，实用性比较好
- 2、数的纸质一般，内容还好
- 3、4.24购买的书今天才到我这，开包后发现书的质量非常大差劲，明显是盗版书！
- 4、送货速度真是堪称神速了！但是书皮上有点条纹压印，不确定是书本身的问题，还是运输过程中弄得，包装比较简陋！
- 5、全书均以MOE为例进行讲解，相当于一本MOE的操作手册。虽然在申请试用软件时，上海康昱盛公司免费寄来了样书，但还是又买了本给实验室其他人用。毕竟看纸质书比电脑上看说明舒服多了啊。
- 6、讲解详尽，适合初级奠定基础
- 7、对于我这个初学者来说，是一本不错的属
- 8、相当于一本MOE软件的操作手册。
- 9、挺不错的，也比较实用

《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:www.tushu000.com