

基于配体的药物设计

1. QSAR

QSAR概述

QSAR的概念、应用、历史

QSAR的研究过程

生物活性

结构参数

QSAR三要素

构效方程

研究方法

基团贡献加和

回归分析

主成分、PLS

机器学习

统计参数: r^2 、S、F

方程解读

二维定量构效关系

Hansch-藤田

FreeWilson

发展及基本假设

研究过程

研究方法: CoMFA、CoMSIA、SoMFA、MFA、MSA

三维QSAR

分子三维结构的叠合: 方法、程序

CoMFA

训练集和测试集

分子场的计算

PLS分析

等势面分析

HQSAR

EVA

QSAR讨论

2. QSAR实际操作演示

6. 实例介绍

5. 其它方法(略)

4. 3D相似性: 分子叠合(略)

3. 药效基团

概念及应用

药效基团的定义

基于药效基团的数据库搜寻

操作演示