

<<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

## &lt;&lt;手性化合物的构效关系研究&gt;&gt;

## 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>