

课程名称：药物设计

一、课程编码：1000033

课内学时：32 学分：2

二、适用学科专业： 制药工程

三、先修课程： 药物化学、有机化学

四、教学目标

通过本课程的学习，使学生掌握药物设计的基本概念和基础理论知识，熟悉分子的多样性、互补性和相似性在药物设计中的地位和作用。通过学习先导化合物的优化、前药设计与应用、构效关系、计算机辅助药物设计等内容，能够从总体上把握常用的药物设计方法的特征、应用范围和内在联系，为学生从事药物设计与开发工作奠定基础；通过文献阅读与交流、撰写综述性文章提高学生进行药物研究的能力。

五、教学方式

课堂讲授 28 学时，文献报告与交流 4 学时。

六、主要内容及学时分配

- | | |
|--------------------------------|------|
| 1. 绪论 | 2 学时 |
| 1.1 药物研究与开发的基本流程 | |
| 1.2 药物设计的发展及前沿领域 | |
| 2. 药物设计的生命科学基础 | 2 学时 |
| 2.1 药物与生物大分子的相互作用 | |
| 2.2 药物的代谢及药代动力学基础 | |
| 3. 基于分子多样性的药物设计 | 5 学时 |
| 3.1 分子多样性概念 | |
| 3.2 天然产物与药物设计 | |
| 3.3 组合化学与药物设计 | |
| 3.4 多组分反应与药物设计 | |
| 4. 基于药物代谢原理的药物设计 | 5 学时 |
| 4.1 前药的原理及设计方法 | |
| 4.2 软药的概念及其应用 | |
| 4.3 孪药的概念及其应用 | |
| 5. 基于分子相似性的药物设计 | 5 学时 |
| 5.1 生物电子等排的概念及其应用 | |
| 5.2 药效团的概念及其应用 | |
| 5.3 优势结构的概念及其应用 | |
| 5.4 肽模拟物的基本设计方法 | |
| 6. 计算机辅助药物设计 | 6 学时 |
| 6.1 基于生物大分子靶点结构的药物设计：分子对接与虚拟筛选 | |
| 6.2 反向对接与多药药理学 | |
| 6.3 计算机辅助药物设计研究进展 | |
| 7. 药物设计新方法 | 3 学时 |
| 7.1 基于波谱学的药物设计方法 | |
| 7.2 多维度模式下的药物设计 | |
| 8. 药物设计案例分析与讨论 | 4 学时 |

七、考核与成绩评定

成绩按百分制。

成绩评定依据:平时成绩 40%，期末药物设计报告成绩占 60%。

八、参考书及学生必读参考资料

1. 郭宗儒. 药物分子设计[M]. 北京: 科学出版社, 2005 年.

2. 徐文芳. 药物设计学[M]. 北京: 人民卫生出版社, 2007 年.

九、大纲撰写人: 徐志斌