

化学信息学

化学信息学

学科概念和研究内容、意义

化学信息学与计算机化学、化学计量学、计算化学、分子模拟
化学信息学与生物信息学

分子作图软件、分子结构在计算机中的表示

分子作图软件

- ChemDraw
- ChemWin
- ChemSketch
- ISIS/draw

分子结构在计算机中的表示

- 一维: SLN、Smile
- 二维: 连接表
- 三维: 内坐标
直角坐标
- 分子文件格式
- 电荷: 形式电荷、部分电荷
- 注意手性中心

分子模拟/计算化学

理论方法

- 量化方法QM
 - 从头算
 - 半经验
- 分子力学MM
- 各种分子模拟方法比较

分子力学力场类型

- 第一代力场
- 第二代力场
- 通用力场

分子构象搜寻方法

- 系统搜寻
- grid扫描
- 经验搜寻
- 分子动力学
- 模拟淬火

结构优化

- 算法
 - 最陡下降法
 - 共轭梯度法
 - 牛顿法
- 参数
 - 初始结构
 - 力场
 - 电荷
 - 最小化算法
 - 步长
 - 步数
 - 收敛限: 能量差、梯度差

实验操作: 分子二维结构的输入和三维结构优化

化学信息学在药物设计中的应用

- ADMET
- 虚拟组合化学库
- 数据库比较
- Fragment拆分、FBDD
- 药物设计中 2D数据呈现方式
- 类药性
- 生物相关性

实验操作: 化学数据库的查询、处理

- ISIS/host base
- ChemFoler in ACD/labs
- ChemFinder in ChemOffice
- Unity in sybyl
- Catalyst
- Accord

数据库系统

小分子数据库

- ChemIndex
- MDL
- CRC-CCD
- 天然产物
- 配体库
- 一般小分子
- 活性数据
- DITOP: 药物毒性相关蛋白数据库
- CCDC

实验操作: 分子描述符与分子相似性的计算

概念与意义

- 依据
- 公式
- 注意

计算方法

- 结构相似性
- 活性相似性
- 谱图相似性
- 毒理相似性

相似性标准

相似性矩阵: 分子多样性分析

分子相似性

概念

- 一维分子描述符
- 二维分子描述符
- 三维分子描述符
- 计算软件

分子描述符的计算