

# 《药物分析丛书·药物分析信息学及应用》

## 书籍信息

版次：1

页数：225

字数：364000

印刷时间：2009年11月01日

开本：16开

纸张：胶版纸

包装：平装

是否套装：否

国际标准书号ISBN：9787117116121

## 内容简介

当今时代的基本特征是信息爆炸。围绕在我们周围，信息量之大，传播速度之快前所未有。从学科发展角度深刻把握药物质量问题的信息特征，按分析科学和信息学的原理揭示药物质量问题的本质，有助于学生掌握药物分析学的核心，从信息的获得、信息的处理、信息的管理到信息的共享，给学生一个全新的视角和思路，这是本书的宗旨。

本书取名为药物分析信息学及应用，意指对以药物质量相关问题为主要研究对象的分析化学信息进行表达、解析、模拟、管理和传输，揭示分析化学信息的实质与内在联系。实现分析化学信息的获得、挖掘、变换与共享，不仅有助于分析化学的深化和发展，促进药学分析学科的发展，也有助于以分析化学信息学的视角考量和解决以分析化学为技术手段的相关学科，包括生命科学、环境科学、化学化工等学科目前面临的实现复杂物质体系定性定量描述的共同任务，以迎接新的挑战。

复杂物质体系分析是21世纪的重大研究课题。几乎所有与化学有关的各行各业都有复杂物质体系分析的任务，从生命科学角度看，特别是复杂有机物质体系分析的任务。如生命与各种生命现象的物质基础，复方药物制剂，天然产物、中药及其提取物，食品、生物样品、体液、临床分析样品等的定性定量。复杂物质体系化学信息的主要特征是：

组成复杂，组分多且多变化； 各组分含量相差悬殊，含未知组分及其他不确定因素。目前复杂物质体系定性定量描述\*技术之一是特征（指纹）谱分析。凡是与待分析物质的特性与含量具有函数或相关关系的稳定信息，都可以通过特征提取、信息挖掘、信息变换、信息压缩以及信息可视化制备特征谱，通过特征谱比对和其中主成分相对量的表达对该物质进行定性定量描述（定性：是什么、存在与否、有没有变化；定量：准确定量或确定上下限范围）。

## 目录

### 第一篇 药物分析信息学基础

#### 第一章 绪论

##### 一、分析化学发展趋势——分析化学、分析科学到分析化学信息学

###### （一）从分析化学的定义说起

###### （二）分析化学已经发展到分析科学、分析化学信息学阶段

##### 二、现代药物分析——药学中的分析化学信息学（药物分析信息学）

###### （一）获取化学量测数据

###### （二）从分析数据中提取有价值信息

###### （三）信息管理（存储、传输和共享）

##### 三、药物分析信息学主要研究方向

###### （一）复杂物质体系分析的方法学研究

###### （二）现代药物分析应用研究

###### （三）分析仪器的智能化研究

#### 第二章 药物分析信息的获得

## 第一节 常见样品制备及前处理

### 一、天然药物

- (一) 原料(药材)的品种鉴定
- (二) 原料(药材)的粉碎
- (三) 天然药物的提取
- (四) 天然药物的分离与纯化

### 二、生物样品

- (一) 常用生物样品采集及储存
- (二) 生物样品分析前处理技术

## 第二节 光谱分析法及数据特点

### 一、电磁辐射及其与物质的相互作用

### 二、光谱分析法的定义及分类

- (一) 吸收光谱法
- (二) 发射光谱法
- (三) 质谱法

### 三、光学分析仪器的基本组成

### 四、光谱数据特点

## 第三节 色谱分析法及数据特点

### 一、色谱分析法的定义及分类

### 二、色谱分离原理

- (一) 液固色谱法
- (二) 液液色谱法
- (三) 离子交换色谱法
- (四) 离子对色谱法
- (五) 排阻色谱法

### 三、色谱数据特点

## 第三章 药物分析信息的预处理、数学变换及可视化

### 第一节 信息预处理方法

#### 一、平滑与求导

- (一) 平滑
- (二) 求导

#### 二、不等性方差噪声的扣除

#### 三、二维数据的背景扣除

#### 四、色谱峰偏移校正

- (一) 一维色谱的内标峰校正法
- (二) 一维色谱的外标线性回归法
- (三) 二维色谱中局部最小二乘校正法

### 第二节 数学变换

#### 一、导数光谱法

- (一) 概述
- (二) 原理
- (三) 计算方法

- (四) 应用实例
- 二、正交函数法
  - (一) 原理
  - (二) pj法
  - (三) Pj法
  - (四) 复合多项式法 (combined polynomials method)

### 三、傅里叶变换

- (一) 原理
- (二) 傅里叶变换在仪器中的应用——FT-IR

### 四、小波变换

#### 第三节 信息可视化

.....

第四章 药物分析信息的处理——基础算法

第五章 药物分析信息的处理——数据解析

第六章 模式识别技术简介

第七章 药物分析信息的管理与共享

第二篇 药物分析信息学的应用

第一部分 在分析方法学研究中的应用

第二部分 在中药分析中的应用

第三部分 在化学药品及生物样品分析中的应用

附录

参考文献

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.tushupdf.com](http://www.tushupdf.com)