

“十一五”国家重点图书

●●普通高等教育制药类专业规划教材

药学专业 实验教程

主 编 © 唐 贇

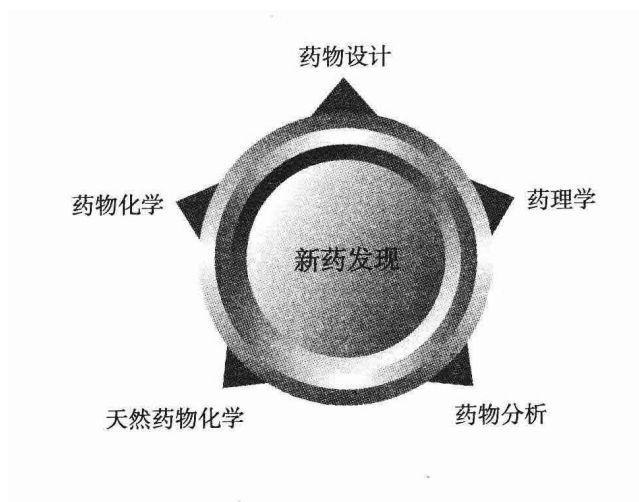


华东理工大学出版社
EAST CHINA UNIVERSITY OF SCIENCE AND TECHNOLOGY PRESS

“十一五”国家重点图书
普通高等教育制药类专业规划教材

药学专业实验教程

主 编 唐 贇



华东理工大学出版社
EAST CHINA UNIVERSITY OF SCIENCE AND TECHNOLOGY PRESS

图书在版编目(CIP)数据

药学专业实验教程/唐贇主编. —上海: 华东理工大学出版社, 2010. 7

(普通高等教育制药类专业规划教材)

ISBN 978-7-5628-2812-9

I. ①药... II. ①唐... III. ①药理学-实验-高等学校-教材 IV. R9-33

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2010)第 088042 号

“十一五”国家重点图书

普通高等教育制药类专业规划教材

药学专业实验教程

主 编/唐 贇

责任编辑/胡 景

责任校对/金慧娟

封面设计/陆丽君

出版发行/华东理工大学出版社

地址: 上海市梅陇路 130 号, 200237

电话: (021)64250306(营销部) 64252174(编辑室)

传真: (021)64252707

网址: press.ecust.edu.cn

印 刷/常熟华顺印刷有限公司

开 本/787 mm×1092 mm 1/16

印 张/14.5

字 数/365 千字

版 次/2010 年 7 月第 1 版

印 次/2010 年 7 月第 1 次

印 数/1-2000 册

书 号/ISBN 978-7-5628-2812-9/R·20

定 价/35.00 元

(本书如有印装质量问题, 请到出版社营销部调换。)

编委会名单

主 编：唐 贇

副 主 编：邓卫平、胡立宏、叶金星、刘建文

编写人员：

唐 贇、刘桂霞、李卫华、程家高(药物设计实验)

邓卫平、李 剑、杜文婷(药物化学实验)

马 磊、胡立宏(天然药物化学实验)

景秋芳、叶金星(药物分析实验)

刘建文、黄永平、王春丽(药理学实验)

前 言

药学是有关药物发现与开发、药品生产与检验、药品流通与使用、药事管理与法规等内容的一门学科。药学专业是以化学和生物学作为基础学科,以药学作为主修学科的本科专业,因而具有极强的实践性。药学专业实验是培养学生实践动手能力,使学生有效掌握专业知识的重要途径和手段,因此需要认真设置实验内容。

目前我国高等药学教育的课程设置仍然比较传统,譬如药物化学、药理学、药剂学等,偏向于传授已有的药物知识,培养的学生也多就业于医院与药房,能够进制药公司或研究机构从事新药研发工作的较少。为适应时代发展的需要,华东理工大学药学院药学专业按照全新的办学理念,着重培养学生现代创新药物研究意识和能力,即在传授书本知识的同时,强调学生的实际动手能力,为进一步深造以从事创新药物研究打下坚实的基础。因此,我们将现代创新药物研究的基本思想融入药学专业实验课程中,在国内首创“药物设计→药物化学→药物分析→药理学”的全新药学实验体系,并建立了高水平、标准化的药学专业实验室,成为学生获得专业实验技能的场所。具体内容如下。

(1) 药物设计实验 药物设计是现代创新药物研究的基础,也是我们有别于国内其他高校药学专业的特色课程之一。实验内容包括 Linux 系统基本操作、小分子模拟、大分子模拟、小分子-大分子相互作用模拟、虚拟筛选等。

(2) 药物化学实验 药物化学是现代创新药物研究的核心,是获得化合物样品的主要手段。它与一般的有机化学目的不一样,因而要求也不同。因为药物是一种与人体作用的精细化学品,需强调其合成原料价廉易得,合成路线简单易行,合成产物安全稳定。实验内容主要涉及常量、半微量操作,无水无氧操作,以及反应产物在物理性质(结晶、熔点、NMR 等)上的鉴定分析等。

(3) 药物分析实验 包括使用红外光谱、紫外光谱、核磁共振、质谱、X 射线、圆二色谱、气相色谱、液相色谱等仪器进行物质成分分析、分离与提纯、结构测定、定性定量分析等,以及多种仪器的联用如色谱质谱联用。

(4) 药理学实验 包括分子水平实验和细胞水平实验,涉及蛋白质克隆、表达、纯化等基本分子生物学操作以建立分子模型,采用显微镜进行细胞培养和分离操作以建立细胞模型,分子水平结合亲和力和测定,细胞水平抑制活性测定等。

另外,天然药物是药物先导化合物的重要来源,我们也尝试开设了部分天然药物化学实验供学生选修,让有兴趣的学生熟悉如何从天然资源中获取化合物样品。





本教材的特色为:实验内容设置紧密围绕后基因组时代的创新药物研究,培养学生在药物发现各个环节的基本实践动手能力。整个实验共设置 128 学时(4 学分),每个环节 32 学时(1 学分),天然药物化学实验部分为选修内容(16 学时 / 0.5 学分)。每部分先是基本实验技能介绍,然后有多个具体实验供选择使用。具体实验也是循序渐进的,先基础,后综合,最后是设计型实验。每个实验标明了课时数以及实验类型(基础型、综合型还是设计型)。所有的实验都经过了至少三届学生的实践。

本教材在编写过程中,获得了华东理工大学 2007 年校优秀教材出版基金的资助,在此表示感谢!

当然,限于编者学识水平及经验不足,缺点和错误一定难免存在,敬请使用本教材的老师和学生多提宝贵意见。我们自己也将在使用过程中不断总结经验教训,以便教材的进一步修订和完善。

唐 贇

2010 年 2 月于上海华东理工大学



实验结果的整理与实验报告的书写

实验报告的格式和要求如下。

一般情况:年级、班级、组别、成员、主要操作者、执笔人,地点,时间,天气、室温;

实验名称:_____;

实验目的:_____;

实验原理:_____;

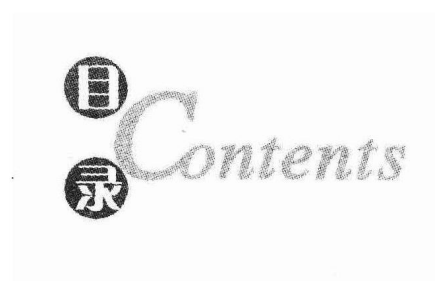
实验方法:_____;

实验结果:记录应该真实、详尽;要对实验的原始资料进行适当的整理加工,必要时应该进行统计学分析。图示法:数据曲线、绘图;要有题目、序号。表格法:要有题目、序号。文字描述法:要注意层次、文字要精练规范。

讨论:讨论是运用所掌握的理论知识,提高分析推理,对实验中出现的实验现象和实验结果进行科学解释的过程。讨论要有根据,实事求是,符合逻辑;非预期结果要分析其产生的可能原因;要有明确的目的性,不必面面俱到。

结论:结论是在讨论的基础上从实验归纳出的科学性、概括性的判断,也就是对实验所能验证的概念、原则或理论的简要总结。结论和实验目的是相互呼应的,未能充分验证的内容不能写入结论。

参考文献:尊重他人劳动,体现自我劳动。



第 1 章 药物设计实验	1
实验须知	1
1.1 药物设计实验基础	2
1.1.1 基本实验条件	2
1.1.2 计算机操作系统与基本命令	5
1.1.3 分子模拟基本概念	9
1.1.4 分子模拟基本技能	16
1.2 药物设计实验	19
实验 1.1 Linux 系统基本操作	19
实验 1.2 蛋白质结构显示和分析	21
实验 1.3 蛋白质序列比对分析	22
实验 1.4 蛋白质同源模建	25
实验 1.5 小分子模拟及构象分析	30
实验 1.6 小分子半经验量子化学计算	36
实验 1.7 小分子药效团模型构建	39
实验 1.8 2D-QSAR 分析(综合型实验)	45
实验 1.9 分子对接(综合型实验)	49
实验 1.10 虚拟筛选(综合型实验)	53
实验 1.11 设计型实验	59
第 2 章 药物化学实验	60
实验须知	60
2.1 药物化学实验基础	63
2.1.1 过滤	63
2.1.2 重结晶	64
2.1.3 蒸馏	65
2.1.4 萃取	68
2.1.5 干燥	69
2.1.6 薄层色谱	71
2.1.7 柱色谱	72
2.2 药物化学实验	74
实验 2.1 阿司匹林的合成	74
实验 2.2 扑炎痛的合成	76



实验 2.3	二氢吡啶钙离子拮抗剂的合成	78
实验 2.4	磺胺醋酰钠的合成	80
实验 2.5	盐酸普鲁卡因的合成	83
实验 2.6	氟哌酸的合成	86
实验 2.7	苯妥英钠的合成	92
实验 2.8	抗皮肤癌新药 Zolanza (SAHA) 的合成(设计型实验)	94
第 3 章	天然药物化学实验	95
实验须知		95
3.1	天然药物化学实验基础	96
3.1.1	提取技术概述	96
3.1.2	分离技术概述	97
3.2	天然药物化学实验	99
实验 3.1	从三颗针中提取、分离小檗碱与小檗胺	99
实验 3.2	实验芦丁的提取与鉴定	102
实验 3.3	大黄中的蒽醌类化合物的提取	106
实验 3.4	从穿山龙中提取分离薯蓣皂苷元	109
实验 3.5	牛蒡子中牛蒡苷元的提取分离	112
第 4 章	药物分析实验	115
实验须知		115
4.1	药物分析实验基础	116
4.1.1	容量仪器的校正	116
4.1.2	药物分析实验误差及数据处理	118
4.1.3	定量分析方法	122
4.2	药物分析实验	136
实验 4.1	葡萄糖的一般杂质检查	136
实验 4.2	折射法测定葡萄糖的含量	140
实验 4.3	复方乙酰水杨酸片中乙酰水杨酸、非那西丁和咖啡因的含量测定 (经典容量分析法)	142
实验 4.4	复方新诺明片中磺胺甲基异噁唑及甲氧苄啶的测定 (双波长分光光度法)	144
实验 4.5	复方新诺明片中双组分的含量测定(高效液相色谱法)	146
实验 4.6	荧光分光光度法测定盐酸苯海拉明片含量	148
实验 4.7	牛黄解毒片中冰片的含量测定	150
实验 4.8	AD 胶丸中维生素 A 的含量测定	151
实验 4.9	药物的鉴别实验(综合型实验)	153
实验 4.10	药物的含量测定(设计型实验)	155
第 5 章	药理学实验	157
实验须知		157
5.1	药理学实验基础	158

5.1.1 药理学实验的目的要求	158
5.1.2 药理学实验基本设计原则	158
5.1.3 药理实验相关知识与技能	159
5.2 药理学实验	167
实验 5.1 细胞的传代培养	167
实验 5.2 细胞计数生长曲线的绘制	169
实验 5.3 唑盐(MTT)比色实验	171
实验 5.4 基因报告实验	173
实验 5.5 糖皮质激素的抗炎作用	175
实验 5.6 药理学实验基本技能	176
实验 5.7 伸筋草提取液抗炎、镇痛实验	177
实验 5.8 人参皂苷提取液抗疲劳、耐缺氧实验	179
实验 5.9 酸枣仁改善记忆作用的综合评价	181
实验 5.10 中药抗氧化作用评价实验	183
实验 5.11 创新探索性实验	185
附录	186
附录 1 常用有机溶(试)剂的纯化	186
附录 2 常见实验参数	188
附录 3 常用的培养液成分及配制	196
附录 4 动物实验的相关知识及技能	198
参考文献	217
后记	218



第1章 药物设计实验

唐赞、刘桂霞、李卫华、程家高

(华东理工大学药学院分子模拟与设计实验室)

实验须知

药物设计实验室是上机实习的场所,所有来实验室上机的学生均有责任和义务营造良好的学习氛围,服从老师的安排,并遵守实验室的规章制度。具体内容如下。

1. 按时实验,未经许可不得迟到或拖延。无故迟到二十分钟以上者,授课老师有权取消本次上机资格。

2. 实验前应预习实验内容,了解实验目的、原理和要求;实验时要按规定操作和使用,如果出现故障或损坏,应该及时报告和登记,并按相关规定处理。

3. 学生进入实验室,必须保持肃静。在指定的机器上机,未经许可,不得随意串机或使用多台机器;不得随意开机关机。授课老师许可后,方可开始使用机器,并正确登录自己的账号。

4. 上机操作内容必须是本次实验课程内容,不得进行与课程内容无关的操作,如上网浏览新闻,看电视电影,玩电子游戏或网上聊天等。

5. 自觉遵守《中华人民共和国计算机信息系统安全保护条例》和《中华人民共和国计算机信息网络国际联网暂行规定》,严禁浏览、下载或传播不健康甚至淫秽信息。

6. 不得随便拆装计算机上的任何接口,不得触碰电源电缆,以免发生故障;不得擅自拷贝、添加、删除计算机内程序;不得修改机内配置。因操作不当而造成的机器损坏或软件破坏必须照价赔偿。

7. 严禁携带食品、饮料等入室;禁止吸烟,乱扔果皮、纸屑;严禁接打手机、语音聊天;自觉维护室内卫生,共同维护清洁、安静的上机环境。

8. 上机结束,请退出自己的账号,同时放好鼠标和键盘,椅子摆放整齐,并认真翔实填写“上机实习使用记录本”。





1.1 药物设计实验基础

创新药物研究的第一步是采用计算化学工具进行分子模拟和药物分子设计,为下一步的药物分子合成提供理论依据和指导。但药物设计学不仅是一门理论性学科,而且具有很强的实践性,因此如何培养学生的药物设计实践技能非常具有挑战性。

药物设计实验课程开设的目的,就是希望配合“药物设计学”理论课程的学习,训练学生实践动手能力,同时巩固课堂所学知识,让学生最终能自己动手开展简单的药物设计研究。如何在 32 学时内对药物设计基本技能有所了解和掌握,实验课程内容的设置就显得很有讲究。通过对国内外相关实验内容进行调研,并结合编者本人从事药物设计研究近二十年的心得体会,确定了 11 个具体实验,包括 7 个基础实验、3 个综合型实验和 1 个设计型实验。基础实验主要是对药物设计中的一种基本技能进行操作训练;综合型实验则要用到两种或多种基本技能;而设计型实验则让学生根据指定的实验目的及所学过的基本技能,自己设计实验内容和方法步骤,并进行操作,得到结果。这样安排使实验有一个由浅入深、由简到繁的逐步提高过程。这些实验循序渐进,可满足药物设计实验训练的需要,最后一个设计型实验可作为考核内容。

药物设计实验与药物化学等后续实验相比,一个主要区别就是,药物设计实验是一种特殊的实验,需要在计算机上完成,而不是在瓶瓶罐罐里完成。因此要进行药物设计研究,除了需要掌握药物设计的基本原理和方法之外,还需要具备一定的计算机操作系统和分子模拟知识作为基础。下面予以简单介绍。

1.1.1 基本实验条件

药物设计实验与其他“湿”的实验如药物化学实验不同,它是一种“干”的实验,需要在计算机房,并具有一定的软硬件设施才能进行。因此药物设计实验室与一般的实验室相比,具有一定的特殊性。此处首先介绍药物设计实验室需具备的一般软硬件设施(药物设计实验须知请见前页)。

以我们的药物设计实验室建设为例:2005 年 8 月开始筹建实验室,通过教育部修购基金、校新专业建设经费及本课题组的科研经费,购置了一台服务器及 10 台 PC 机,构成服务器/客户机(server/client)集群系统,同时购买了 Schrödinger 分子模拟与设计软件一套;到 2006 年 6 月初步建成了本科药物设计实验室。后来陆续增添了 8 台 PC 机,使得 PC 机达到 18 台,这样两人一组,可供一个 36 人的班级开设药物设计实验课程。

药物设计系统通常由计算机硬件和软件两部分组成,由于互联网的飞速发展,网络资源在药物设计中也起着越来越重要的作用。下面对这些常用资源进行简单介绍。

1. 常用药物设计硬件

由于药物设计通常涉及大量的计算和信息处理,因而具有超速计算功能的大型计算机是必不可少的。这些计算机通常采用服务器/客户机模式运行,主要承担计算量巨大的任务如量子化学计算、分子动力学模拟、高通量虚拟筛选等。根据构建方式的不同,大型计算机主要分为超级计算机(supercomputer)和高性能计算机集群系统(high-performance computing cluster, HPCC)两种。

超级计算机如 Cray Jaguar、IBM Blue Gene、SGI Origin 3800 等,这种机器通常是一台计算机含有成百上千个 CPU,因而价格昂贵,现在更倾向于采用 HPCC。HPCC 通常含有多个节点,每个节点都可以是独立的计算机,其中一个为主节点,行使服务器的功能,用于用户登录和账户管理,其他的均为计算节点,节点之间通常采用千兆网线(gbit cables)和交换机(hubs)连接,以尽量减少线路对数据传输的阻碍。除专门设计的框架式 HPCC 外,用户也可自己将多台 PC 机相并联而组装成 HPCC,因而价格相对低廉。HPCC 的操作系统通常采用 Linux 系统,如 Redhat Linux AS 4.0 等。

大型计算机除本身需要有大容量硬盘外,还可以连接大容量存储设备,以储存海量的信息。为了维护计算机系统的电源稳定及不受突然停电的损坏,通常还要连接不间断电源设备(UPS)。

同时,药物设计中经常要进行分子图形显示分析,如蛋白质结构显示分析、药物-受体相互作用分析、量子化学计算结果分析等,因此图形工作站(graphics workstation)也是必不可少的,如以前常见的 SGI O2 等。不过现在随着计算机的日益普及以及 PC 机图形功能的提高,许多配备独立显卡的 PC 机也能进行图形显示分析,这样硬件的价格也大大下降了。为了加强观看分子三维结构的效果,可以配备立体眼镜。当然,如需要将分子模拟的结果进行打印,还需要配备彩色打印机。

2. 常用药物设计软件

通常的软件支持除系统软件(如 SGI 工作站上的 IRIX 操作系统、HPCC 上的 RedHat Linux 操作系统)外,还需要有相关的应用软件,如 Tripos 公司的 SYBYL 分子模拟和分子设计软件包等。常用药物设计软件根据功能的不同可以分为如下类型。

量子化学计算:如 Gaussian, Gamess, Jaguar, MOPAC 等。

分子力学和分子动力学计算:如 CHARMM, AMBER, GROMOS, GROMACS 等。

分子对接和打分评价:如 DOCK, Autodock, GOLD, Glide, FlexX 等。

药效基团模建:如 Catalyst, DISCO, Phase 等。

同源蛋白模建:如 Modeller, Composer 等。

分子图形显示、分析:如 PyMol, DS Visualizer, RasTop 等。

小分子二维结构绘制:如 ISIS/Draw, ChemDraw 等。

二维到三维结构转换:如 CONCORD, CORINA 等。

一些商业软件公司将上述功能模块集成,形成了一些药物设计软件包,比较著名的有:

Tripos 公司的 SYBYL 软件包, <http://www.tripos.com/>

Accelrys 公司的 Discovery Studio 软件包, <http://www.accelrys.com/>

Schrödinger 公司的 Maestro 软件包, <http://www.schrodinger.com/>

Chemical Computing Group 的 MOE 软件包, <http://www.chemcomp.com/>

Symyx 信息公司(原 MDL 公司): ISIS 软件、MDDR、CMC、ACD、SCD 等数据库, <http://www.symyx.com/>

3. 常用网络资源

随着互联网的迅速发展,网络资源对分子模拟和药物设计的作用日益显得重要。通过网络,我们可以迅速进行相关文献检索、免费分子模拟软件下载等,尤其是可以迅速获得基因序列、蛋白质序列、序列比较分析、蛋白质三维结构等生物学信息,以及小分子数据库、网络在线检索小分子、小分子性质在线预测等化学信息。



互联网上的有关资源一般都是免费使用的,大体上可以分为以下几种类型:① 数据库,从小分子到大分子,从基因序列到蛋白质结构,网络数据库资源应有尽有;② 免费软件,通过网络可以免费下载许多用于分子模拟与设计的程序和软件;③ 在线服务网站,除免费软件下载外,越来越多的网站提供在线服务功能,即 Web Server,直接在网页上进行相关操作而得到结果;④ 综合位点和专业 BBS 论坛,可获得许多信息,甚至在线与同行进行交流讨论,获得帮助。表 1-1 列出了一些常用网络资源及链接。

表 1-1 常用网络资源

资源类型、名称	网站地址
数据库	
蛋白质序列库 PIR	http://pir.georgetown.edu/
基因序列库 GenBank	http://www.ncbi.nlm.nih.gov/Genbank/index.html
京都基因大全 KEGG	http://www.genome.jp/kegg/
蛋白质结构数据库 PDB	http://www.rcsb.org/pdb/
核酸结构数据库 NDB	http://ndbserver.rutgers.edu/
潜在药物靶标数据库 PDTD	http://www.dddc.ac.cn/pdtd/
蛋白质-配体结合数据库 BindingDB	http://www.bindingdb.org/bind/index.jsp
NIH 小分子数据库 PubChem	http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/
商用化合物数据库 ZINC	http://zinc.docking.org/
药物数据库 DrugBank	http://www.drugbank.ca/
毒性数据网络 TOXNET	http://toxnet.nlm.nih.gov/
在线服务	
蛋白质序列检索 SWISS-PROT	http://www.expasy.ch/sprot/
同源模板检索 BLAST	http://www.ncbi.nlm.nih.gov/BLAST/
同源模板检索 Fasta	http://www.ebi.ac.uk/Tools/fasta33/index.html
序列比对 ClustalW	http://www.ebi.ac.uk/Tools/clustalw2/index.html
蛋白质结构预测 PredictProtein	http://www.predictprotein.org/
同源模拟 SWISS-MODEL	http://swissmodel.expasy.org/SWISS-MODEL.html
蛋白质结构分析 Prosa	https://prosa.services.came.sbg.ac.at/prosa.php
反向分子对接 TarFisDock	http://www.dddc.ac.cn/tarfisdock/index.php
药代动力学及毒性预测 PreADMET	http://preadmet.bmdrc.org/
小分子性质计算	http://www.molinspiration.com/cgi-bin/properties
小分子 LogP 值计算	http://www.vcclab.org/lab/alogps/start.html
分子描述符计算 E-Dragon	http://www.vcclab.org/lab/edragon/start.html
NCI 小分子数据库在线检索	http://cactus.cit.nih.gov/ncidb2/
免费软件	
格式转换软件 Babel	http://openbabel.org/wiki/Main_Page
分子编辑器 JME	http://www.molinspiration.com/jme/

续 表

资源类型、名称	网站地址
同源模建软件 Modeller	http://salilab.org/modeller/
分子显示软件 RasMol	http://www.rasmol.org/
分子显示软件 PyMol	http://www.pymol.org/
分子显示软件 DeepView	http://spdbv.vital-it.ch/
分子显示软件 VMD	http://www.ks.uiuc.edu/Research/vmd/
分子动力学软件 Gromacs	http://www.gromacs.org/
分子动力学软件 NAMD	http://www.ks.uiuc.edu/Research/namd/
分子动力学软件 Amber	http://ambermd.org/
分子对接软件 DOCK	http://dock.compbio.ucsf.edu/
分子对接软件 AutoDock	http://autodock.scripps.edu/
量子化学软件 GAMESS	http://www.msg.chem.iastate.edu/gamess/
综合位点及专业 BBS 论坛	
计算化学 CCL	http://www.ccl.net/
虚拟计算化学实验室 VCCLab	http://www.vcclab.org/
QSAR 世界	http://www.qsarworld.com/index.php
分子模拟论坛	http://www.mdbbs.org/
小木虫论坛	http://emuch.net/bbs/
Nobel 论坛	http://www.i-nobel.com/bbs/
CHARMM 论坛	http://www.charmm.org/ubbthreads/ubbthreads.php? Cat=0

1.1.2 计算机操作系统与基本命令

常见的计算机操作系统有 Windows、Unix/Linux 等。Windows 系统是大家都熟悉的操作系统,虽然目前已经有一些运行在 Windows 系统下的分子结构绘制、分子图形操作与显示等药物设计相关软件,但总体来说,Unix/Linux 系统更适合于需要较多计算资源的并行计算,如虚拟筛选、分子动力学模拟等,因此,Unix/Linux 在药物设计中更常使用。

Unix 系统通常具有以下特点。

(1) 支持多用户 即可以允许许多用户通过不同的终端,同时在运行 Unix 系统的主机(或者服务器)上操作,主机通过局域网或串行口与终端设备相连。所谓终端,实际上就是没有(或只有很少)自身处理能力,由键盘和显示器组成的供用户进行输入/输出操作的功能特化的简单计算机。用户可通过终端向主机发出指令,运行相应的程序,而输出的结果则可以在此终端的显示器上显示,一台主机往往可以带动数个至上千个终端。如果用户的 PC 已经连入 Internet,在理论上使用 Telnet 可以与全世界任何一台 Unix 主机相连。

(2) 支持多任务 通俗地说,即具有支持同时运行多个程序的能力。例如:用户一边书写一封信件,同时又让主机运行一个大规模的统计程序。在支持多用户的系统中,这种能力是必需的,它使主机提供的计算能力和其他资源得到了最大限度的利用。Unix 是典型的多任务



系统。

(3) 支持多平台 无论是否公布源代码,现代 Unix 及其应用软件一般都用 C 语言编写。对于不同的硬件平台,只需要拥有该平台的 C 编译器,即可完全(或只需极少的修改)将 Unix 操作系统和应用软件移植到相应的平台上,从而可大大减少在软件开发上的重复劳动,又增加了可维护性。

Linux 是一种可以运行在 PC 机上的 Unix 操作系统,由芬兰赫尔辛基大学学生 Linux Torvalds 1991 年开发,因而以他的名字命名。尽管 Linux 的源代码是在 GNU General Public License 的保护下对每个人都是完全免费的,但这并不意味着该操作系统是免费的。因为 Linux 源代码只能使用行命令进行操作,只有少数专家才能熟练运用,而大多数人没法使用,因此不同厂商采用类似于 Windows 系统的界面,对 Linux 系统进行包装,使熟悉 Windows 系统的用户易于掌握。不同厂商的包装,使得 Linux 具有不同的版本,厂商对包装及服务收取一定的费用。常见的版本有 RedHat Linux 等,我们实验室计算机集群上安置的就是 RedHat Linux AS 4.0 版本。国产的操作系统有 RedFlag Linux 等。Linux 有着广泛的用途,包括网络、软件开发、用户平台等,因此被认为是一种高性能、低开支、可替换其他昂贵操作系统的系统。

Linux 系统采用树型结构来组织目录和文件(图 1-1)。也就是说,整个文件系统有一个“根”(root,根目录),然后在根上分支(directory,子目录,即文件夹),任何一个分支上都可以再分支,支上也可以长出“叶子”(file,单个文件)。

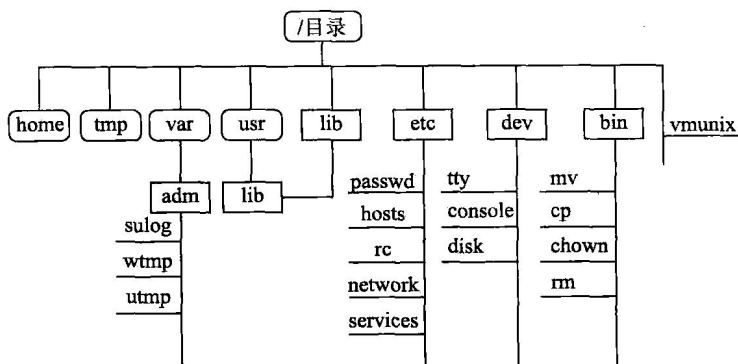


图 1-1 Unix/Linux 文件结构

图 1-1 中, /home 为用户登录和工作目录,各用户账号一般设在这个目录下。/tmp 为临时文件目录, /dev 为设备文件目录, /bin 为可执行程序即操作命令所在的目录。下面介绍一些常用的 Linux 操作命令。

● login 登录系统

从终端进入 Linux 系统主机,首先需要采用 login 登录用户账号,输入用户名(如用户名为 usrp)后,然后输入密码。

login: usrp ✓

password: ***** ✓

即进入系统操作台。

● logout 或 exit 退出系统或注销账号

这是用户退出或注销账号的命令,也可键入组合键(Ctrl)+d 进行注销。

- date 查询日期时间

用户在系统提示符下可以通过一些命令来获得主机的简单信息。例如:要观察主机的时间设置,可用命令:date ✓

系统显示:Thu Apr 6 15:14:07 EDT 2006

- ls 文件及子目录名称列表(list)

使用ls命令可列出当前目录下的文件子目录清单。如要列出文件详细信息,则用ls -l等;如果要显示其他目录中的文件及子目录名称列表,可以使用:ls <路径>, <路径>是用相对法或绝对法书写的到要观察的目录的路径。

- pwd 显示当前目录(present work directory)

使用pwd命令显示当前目录的位置。

- cd 变更目录层次(change directory)

当前目录可用命令cd改变,用法是:cd <路径> ✓

用cd..可返回上一级目录(父目录)。用cd用户可立即返回自己的主目录。

- mv 改变文件、目录名称,搬移文件、目录(move)

mv除了可以改变文件的名称外,还可以改变目录的名称,用户可先用cd命令进入要改变的文件或目录所存在的上级目录处,然后使用:

mv <原文件或子目录名称> <新名称>

- rm 删除文件(remove)

使用命令rm,如果要删除非当前目录下的文件,须加上路径指引。用法如下:

rm <带路径指引的文件名称> ✓

- cp 复制文件(copy)

cp可以跨目录复制文件,用法如下:

cp <带路径指引的源文件名称> <带路径指引的目标文件名称> ✓

与mv命令用法类似,如果省略路径指引,则表示文件位于当前目录;如果省略目标文件名称,则表示进行复制后名称仍保持不变。

- mkdir 创建新的子目录(make directory)

使用的命令是mkdir,用法是:

mkdir [<路径>/] <新目录名称> ✓

<路径>指出新目录所在的位置,如果路径被省略,则表示在当前目录下创建新的子目录。

如当前目录为/a,输入:mkdir b,则在/a目录下产生一个新的子目录b。

- rmdir 删除目录(remove directory)

删除目录的命令是rmdir,用法为:

rmdir <带路径指引的目录名称> ✓

如果省略路径指引,那就表示要删除的子目录位于当前目录下。此命令只能删除空目录,如果用它去删除一个非空(即其内包含文件或子目录)目录,要用rm -r,用法是:

rm -r <目录树的起点目录> ✓

- cat 显示一个文本文件的内容

显示一个文本文件的内容,可以用命令cat,用法为:

cat <文本文件内容> ✓