

普通高等教育“十二五”规划教材
全国高等医药院校规划教材

供高专高职药学及相关专业用

YAOWU HUAXUE

药物化学

主编 孟繁浩

清华大学出版社

“十二五”普通高等教育本科国家级规划教材
“十二五”普通高等教育本科国家级规划教材

中国药科大学“十二五”规划教材

YIAO WU HUA XUE

药物化学

主编 王学军

江苏人民出版社

普通高等教育“十二五”规划教材
全国高等医药院校规划教材

供高专高职药学及相关专业用

YAOWU HUAXUE

药物化学

主编 孟繁浩

清华大学出版社

北 京

内 容 简 介

本教材根据教育部制定的高等教育药学专业专科培养目标,在内容和编写等方面坚持“实用为主,够用为度”的原则,在章节安排上与国内现行的执业药师制度接轨,突出针对性、新颖性、特色性和实用性。在本教材编写过程中,力求取材适当,循序渐进,密切联系生产实际。本教材每章的开篇有“学习要求”,列出了该章中需要学生掌握、熟悉和了解的内容,每章后列有“学习重点”,对该章的重点内容及要求进行了小结,以方便学生自学。全书共计 23 章。本教材供高等院校药学专业专科学生使用,也可供相关专业教师、科研人员参考。

版权所有,侵权必究。侵权举报电话:010-62782989 13701121933

图书在版编目(CIP)数据

药物化学/孟繁浩主编. --北京:清华大学出版社,2011.9
(普通高等教育“十二五”规划教材·全国高等医药院校规划教材)
ISBN 978-7-302-26497-2

I. ①药… II. ①孟… III. ①药物化学—医学院校—教材 IV. ①R914

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2011)第 161690 号

责任编辑:罗 健

责任校对:赵丽敏

责任印制:李红英

出版发行:清华大学出版社

地 址:北京清华大学学研大厦 A 座

<http://www.tup.com.cn>

邮 编:100084

社 总 机:010-62770175

邮 购:010-62786544

投稿与读者服务:010-62776969, c-service@tup.tsinghua.edu.cn

质 量 反 馈:010-62772015, zhiliang@tup.tsinghua.edu.cn

印 装 者:北京国马印刷厂

经 销:全国新华书店

开 本:185×260 印 张:13.75 字 数:334 千字

版 次:2011 年 9 月第 1 版 印 次:2011 年 9 月第 1 次印刷

印 数:1~3000

定 价:29.80 元

产品编号:040011-01

全国高等医药院校药学类及相关 专业规划教材建设成员单位

(按拼音排序)

安徽省立医院	哈尔滨商业大学
安徽医科大学	哈尔滨医科大学
安徽医学高等专科学校	海南医学院
北华大学	河北医科大学
北京大学	黑龙江中医药大学
北京理工大学	湖北中医药大学
北京天坛医院	湖南中医药大学
滨州医学院	华南理工大学
长春职业技术学院	怀化医学高等专科学校
长治医学院	吉林大学
成都医学院	吉林医药学院
成都中医药大学	佳木斯大学
赤峰学院	江苏联合职业技术学院
重庆医科大学	九江学院
重庆医药高等专科学校	兰州大学
大连大学	辽宁大学
大连医科大学	辽宁卫生职业技术学院
第二军医大学	辽宁医学院
第三军医大学	辽宁中医药大学职业及技术学院
福建省漳州卫生职业学院	牡丹江医学院
福建医科大学	南昌大学
复旦大学	南方医科大学
广东药学院	南京医科大学
广东医学院	南京中医药大学
广西医科大学	内蒙古医学院
贵阳中医药大学	宁夏医科大学
桂林医学院	齐齐哈尔医学院

编委会名单

主 编 孟繁浩

副主编 甄宇红 杨 慧 王绍杰

编 委 (按姓氏笔画排序)

王绍杰 (沈阳药科大学)

王 琳 (中国医科大学)

孔晓龙 (广西医科大学)

艾丽娜 (青海卫生职业技术学院)

兰作平 (重庆医药高等专科学校)

杨 慧 (内蒙古医学院)

宋东伟 (天津生物工程职业技术学院)

张 辉 (沈阳医学院)

郝枝花 (安徽医学高等专科学校)

孟繁浩 (中国医科大学)

柯贤炳 (武汉生物工程学院)

唐灵芝 (厦门医学高等专科学校)

梁承武 (吉林医药学院)

韩景田 (滨州医学院)

甄宇红 (大连医科大学)

廖洪利 (成都医学院)

前言

PREFACE

高职高专药学教育担负着为国家培养并输送医药生产、管理、服务等第一线高素质技术应用型人才的重任。高职高专教育的培养目标主要是培养应用型人才，重点是提高学生分析问题和解决问题的能力。清华大学出版社在充分调研的基础上，以培养实用能力的药学人才为目的，组织编写了本教材。本教材主要供药学、药物制剂、临床药学、中药学、制药工程、医药营销等药学类专业高职高专学生教学使用，也可以作为执业药师资格考试、硕士研究生入学考试以及相关科研人员的参考书。

本教材根据教育部制定的高等教育药学专业专科培养目标，在内容和编写等方面坚持“实用为主，够用为度”原则，在章节安排上与国内现行的执业药师制度接轨，突出针对性、新颖性、特色性和实用性。编写过程中力求取材适当，循序渐进，密切联系生产实际。全书按药物作用的靶点或药效分类，以药物化学结构与生物活性的关系为主线，讨论了药物的结构和性质、药物与机体的相互作用、药物在体内的代谢过程、药物的构效关系等。在编写上，注意药物化学与相关学科的衔接与相互渗透，论述了各类药物的发展。本教材每章的开篇有“学习要求”，列出了该章中需要学生掌握、熟悉和了解的内容，每章后列有“学习重点”，对该章的重点内容及要求进行了小结，以方便学生自学。

中国医科大学和清华大学出版社在本教材编写过程中给予了大力支持，教材编写过程中参考并借鉴了许多国内外相关教材和资料，在此一并表示衷心的感谢。限于编者水平和经验，书中难免存在疏漏和错误，恳请广大读者和同仁提出宝贵意见。

中国医科大学 孟繁浩

2011年5月于沈阳

青岛市市立医院
青海卫生职业技术学院
青海医学院
山东大学
山东药品食品职业学院
山东中医药高等专科学校
山西医科大学
陕西中医学院
上海交通大学
沈阳药科大学
沈阳医学院
首都医科大学
四川大学
苏州大学
泰山医学院
天津生物工程职业技术学院
天津医科大学
天津医学高等专科学校
天津中医药大学

潍坊医学院
温州医学院
无锡卫生高等职业技术学校
武汉大学
武汉理工大学
武汉生物工程学院
西安交通大学
西南大学
厦门大学
厦门医学高等专科学校
新疆医科大学
徐州医学院
烟台大学
郑州大学
中国药科大学
中国医科大学
中南大学
中山大学

目 录

第 1 章 冷冲模概述	1
1.1 冷冲压模具的应用及发展方向	1
1.1.1 冷冲压生产及冷冲模的应用	1
1.1.2 冷冲压技术的发展方向	4
1.2 冷冲压模具及模具零件的分类	5
1.2.1 冷冲压模具的分类	5
1.2.2 冲压模具零件的分类	6
1.3 冲压设备及冷冲模的安装	8
1.3.1 通用冲压设备简介	8
1.3.2 压力机的选用与冷冲模的安装	9
第 2 章 冷冲压模具设计与制造基础	13
2.1 冲压成形理论基础	13
2.1.1 金属塑性变形及其影响因素	13
2.1.2 塑性变形时材料的加工硬化	14
2.1.3 塑性变形时的应力与应变	16
2.1.4 冲压成形的变形趋向性及其控制	21
2.1.5 冲压材料及其成形性能指标	23
2.1.6 常用冲压材料的选用	25
2.2 冲压工艺及模具设计过程	26
2.2.1 冲压模具开发的流程	26
2.2.2 冲压工艺及模具设计的内容和步骤	26
2.3 冷冲模制造基础	30
2.3.1 冷冲模制造的特点和要求	30
2.3.2 冷冲模零件的材料和毛坯	31
2.3.3 冷冲模的精密加工	34
2.3.4 模具零件的配制	42
2.3.5 冷冲模的光整加工	43
2.3.6 冷冲模装配基础	14
2.3.7 冷冲模的检测和柔性制造工艺	16

第3章 冲 裁	48
3.1 冲裁变形分析	48
3.1.1 冲裁变形过程	48
3.1.2 冲裁断面	50
3.2 冲裁间隙	51
3.2.1 冲裁间隙的影响	51
3.2.2 合理间隙值的确定	53
3.3 凸、凹模刃口尺寸的确定	56
3.3.1 凸、凹模刃口尺寸的计算原则和公式	57
3.3.2 凸、凹模刃口尺寸的计算步骤	58
3.4 冲压力和压力中心的计算	64
3.4.1 冲压力的计算	64
3.4.2 降低冲裁力的工艺措施	65
3.4.3 压力中心的计算	67
3.5 冲裁工艺设计	68
3.5.1 冲裁件的工艺性	69
3.5.2 冲裁件的排样	71
3.5.3 冲裁工艺方案	77
3.6 冲裁模典型结构	79
3.6.1 单工序模	79
3.6.2 复合模	86
3.6.3 级进模	88
3.7 冲裁模主要零部件设计与制造	93
3.7.1 工作零件	93
3.7.2 定位零件	107
3.7.3 卸料与出件装置	115
3.7.4 导向与支承零件	122
3.7.5 紧固件及其他零件	128
3.8 冲裁模的装配与调试	131
3.8.1 冲裁模主要部件的装配	131
3.8.2 总装配	134
3.8.3 冲裁模的调试	141
3.9 冲裁模设计与制造实例	142
3.9.1 复合模	142
3.9.2 级进模	119
第4章 弯 曲	159
4.1 弯曲变形分析	159

第1章 冷冲模概述

冷冲模即冷冲压模具,亦称冲压模具或冲模,是冲压生产必不可少的工艺装备。本章主要介绍冲压生产和冲模应用的基础知识,以及冲压与冲模技术的发展方向。

1.1 冷冲压模具的应用及发展方向

1.1.1 冷冲压生产及冷冲模的应用

1. 冲压的概念及特点

冲压是利用安装在冲压设备上的模具对材料施加压力,使其产生分离或塑性变形,从而获得所需零件(冲压件)的一种压力加工方法。由于通常是在常温下进行,故又称为冷冲压。冷冲压广泛应用于汽车、仪器仪表、电子电器、航空航天等工业领域以及日常生活用品的生产。

冷冲压与其他机械加工相比,具有以下特点:

(1)材料利用率高。冷冲压是一种少无切削加工方法,材料的一次利用率有时能达到100%,更突出的是,冲压加工几乎没有切削碎料产生,其废料一般均可再为利用,冲制其他零件,从而进一步提高材料利用率,降低材料成本。

(2)生产效率高。普通的冲压设备行程次数为每分钟几十次,高速冲压设备可达每分钟数百次甚至数千次,而每次冲压行程可加工一个或多个冲件。此外,冲压加工操作简单,便于实现自动化的流水作业,减少辅助生产时间。

(3)产品互换性好。这是因为冲压件的尺寸、形状精度均由模具保证,而呈现出“一模一样”的特征,而模具的寿命一般较长,因此冲压件的质量稳定,互换性好。

(4)加工范围广。利用冲压既可加工金属材料,也可以加工多种非金属材料;既可加工简单零件(如圆垫片),又可加工极其复杂的零件(如汽车覆盖件);既可加工极小尺寸的零件(如钟表指针等),又可加工超大尺寸零件(如飞机、汽车覆盖件)。

2. 冲压工序分类

根据冷冲压加工的不同形式,可将其分为分离工序和成形工序两大类。分离工序也称冲裁,是将本来一体的坯料按一定的轮廓线相互分开,从而获得一定的制件形状、尺寸和断面质量的工序;成形工序是使坯料在不破裂的前提下产生塑性变形而获得一定形状和尺寸的制件的工序。此外,还有以冷挤压为代表的立体冲压工序,本书不作讲述。

分离工序和成形工序中,又分有很多具体的基本工序,表1-1和表1-2列出了部分冲压基本工序。

表 1-1 分离工序

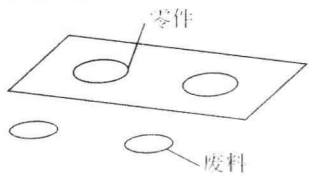
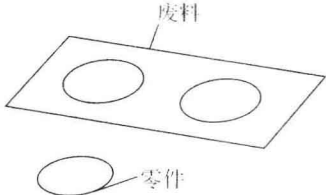
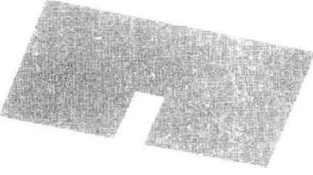
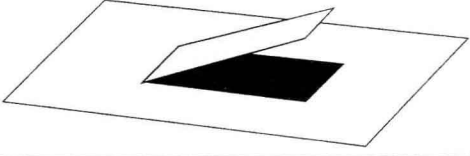
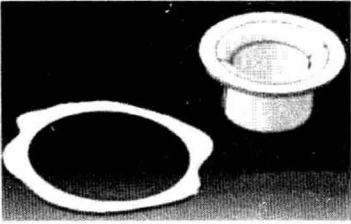
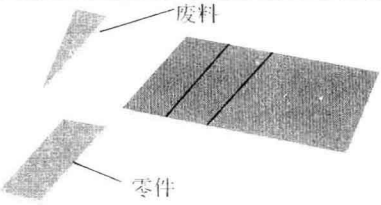
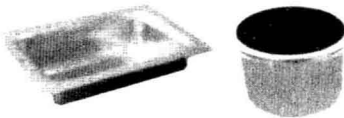
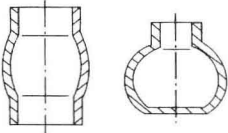
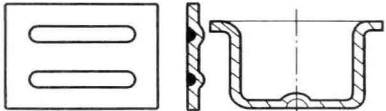
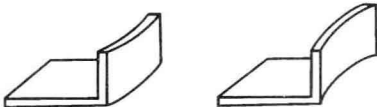
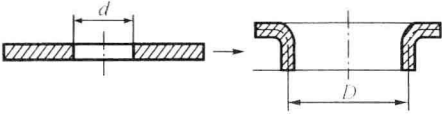
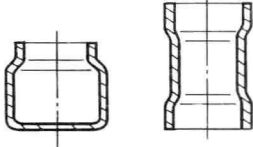
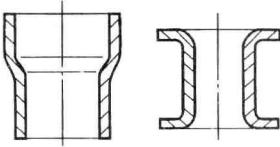
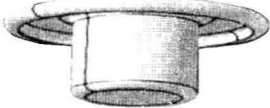
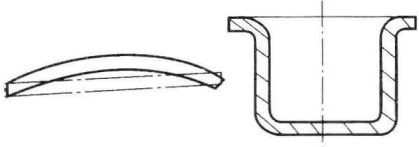
工序名称	工序件图	特点及应用
冲 孔		将废料沿封闭轮廓从材料或工序件上分离出去,在材料或工序件上获得需要的孔
落 料		将板料沿封闭轮廓分离,轮廓线内的材料为零件或工序件
切 口		在材料或工序件的边缘上切出槽口
切 舌		使材料沿敞开轮廓局部而非完全分离,并使相互分离的材料达到要求的空间位置
切 边		修切成形工序件的边缘,使满足形状、尺寸的要求
切 断		将材料沿敞开轮廓分离,得到所需要的零件或工序件

表 1-2 成形工序

工序名称	工序件图	特点及应用
弯 曲		使坯料沿确定的轴线,以一定曲率弯成一定角度。可加工多种形状复杂的弯曲件

续表

工序名称	工序件图	特点及应用
拉 深		使平板毛坯或工序件变形为开口空心件,或使开口空心件进一步改变形状和尺寸
胀 形		将空心工序件或管状零件沿径向往外扩张,使局部径向尺寸按要求增大
起 伏 成 形		通过局部材料的伸长变形,使工序件形成局部凹陷或凸起
外 缘 翻 边		沿外形曲线将外缘材料翻成侧立短边
内 缘 翻 边		将内孔边缘的材料沿封闭曲线翻成竖边
缩 口 缩 颈		使空心工序件或管状零件的口部或中部直径按要求缩小
扩 口		使空心工序件或管状零件的敞开处向外扩张,形成口部直径较大的零件
卷 缘		将空心件开口边缘处的材料沿封闭曲线卷成圆形
校 平 整 形		校平是将带拱弯或翘曲的平板形零件压平,以提高其平直度;整形是通过材料的局部变形来少量改变成形工序件的形状和尺寸,以保证工件的精度

3. 冲压生产的要素及冷冲模的应用

冲压设备、冲压工艺及模具和冲压材料是冲压加工的三个基本要素。冲压设备是冲压生产的动力基础,一般为通用的标准化装备,可根据需要和条件选用。冲压材料多为板材,按冲压工艺要求以一定的形状、尺寸和状态作为冲压加工的毛坯。冲压工艺是冲压加工的核心,是冷冲模设计的理论依据,冷冲模则是冲压工艺的重要体现,是实施冲压加工的关键。因此,冲压模具在冲压加工中至关重要,并且与冲压工艺密不可分,没有符合冲压工艺要求的冲压模具,批量生产冲压件就难以实现,甚至得不到符合技术要求的冲压件。

1.1.2 冷冲压技术的发展方向

到20世纪中叶,塑性变形的理论研究已经相当成熟,但由于受工程技术条件的限制,冷冲模开发和冲压生产却处于较低效率和较低精度的水平。随着计算机技术、控制技术、材料科学以及机床工业等的快速发展,近二十年来,冲压技术的应用发生着日新月异的变化,总的来说,冷冲压技术和冷冲模开发正不断朝着信息化、数字化、精细化、高速化、自动化的方向发展。

1. 冲压工艺方面

冲压成形是极其复杂的多重非线性过程,在工程应用中,依靠人工计算来量化塑性变形的理论研究成果是不可能的,长期以来都是采用定性分析和经验数据初定冲压工艺,复杂而微妙的参数量化则留待模具调试阶段现场确定。到上世纪九十年代,冲压成形的计算机辅助工程(CAE)技术开始在我国进入工程应用。它是采用有限元分析方法,通过计算机软件模拟冲压成形过程,从而实现对工艺方案和模具参数准确、快速的预先评估和优化。目前,CAE软件对冲压成形的仿真程度能达到90%左右,大大缩短了模具开发周期,降低了模具成本。

2. 模具设计和制造方面

(1)模具设计标准化,模具制造专业化、集群化。模具的标准化程度是一个国家模具技术水平的重要标志之一,模具零件的标准化和商品化程度越高,行业内分工就越细,专业化生产的规模就越大,模具的产量、产值就越高,在美、日等西方发达国家,模具零件的标准化率达到80%以上。我国在上世纪中叶就开始建立自己的模具标准,但直到上世纪90年代才开始有了标准件的商品化,并且品种和规格较少,不过此后发展很快,尤其本世纪以来,随着日本和中国台湾的模具零部件企业进入内陆,带来了更完整的标准体系和先进的柔性制造技术,使得我国的模具产业结构发生较大变化,模具标准化率迅速提高,目前已超过40%。模具制造方面,在告别了传统的小而全、自给自足式的生产模式后,专业的模具制造厂家已发展到两万多家,目前,全国各地涌现出许多“以我为主”的“模具城”,模具产业链以被支撑的主行业为载体,正在快速覆盖和延伸,因此,模具制造模式在不断专业化的同时,正在形成地区性与行业性相结合的集群化协作生产模式。可以预见,模具的标准化和专业化生产还将继续深化和扩展到更高水平和更大规模。

(2)模具技术数字化、生产管理信息化、CAE/CAD/CAM一体化。随着数字技术的不断发展,一些知名软件系统(CATIA、UG、Cimatron等)的功能在不断完善和快速升级,CAD(计算机辅助设计)、CAM(计算机辅助制造)以及前面提及的CAE技术正在向集成化方向发展,并且与CAPP(计算机辅助工艺过程设计)技术以及ERP(企业资源计划)、PLM

(产品寿命周期管理)等企业管理系统相结合。集成化数字技术的应用使得模具开发各环节的界限变得更加模糊,冲压产品设计、冲压工艺方案设计、模具设计、模具制造和加工编程,将作为系统化的方案由专业技术软件和管理软件全盘优化解决。数字化技术和信息化管理相结合使得模具开发周期大为缩短,企业经济效益得到全面提升。

(3)加工手段精细化、高速化。慢走丝线切割、数控电火花成型(电火花铣削)、数控磨削、高速铣削等加工技术及设备的普遍应用,一方面使模具制造精度大为提高,尺寸精度达到微米级,表面粗糙度达到 $Ra0.2\mu m$,另一方面在硬加工方面大显神威,除磨削外,电火花、线切割、高速铣削均能高精度地加工淬硬钢件。各种不同特点的加工技术的综合应用,不仅适应了不同模具结构的精微加工,而且加工效率得到极大的提高。

(4)模具产品特征多极化。随着汽车、航空、电子、信息等国民经济支柱产业的迅猛发展,冲压模具一方面趋向大型化、复杂化、精密化,同时又朝着高效率、高寿命、多功能、多工位方向发展。同时,为了适应现代工业产品更新换代快的特点以及小批量生产和新品试制的需要,各种快速经济模具也逐渐成为冲模行业的一个独特领地,以快速成型技术(RT)为基础的快速制模技术将得到进一步发展和更广泛应用。

另外,新型模具材料及热处理方法也在不断发展,以适应各类模具的质量要求,真空热处理、气相沉积等先进处理方法将得到进一步完善和更广泛的应用。

3. 冲压自动化方面

基于前述冲压加工的特点,自动化作业是冷冲压生产当然的发展方向,主要体现在两个方面。一方面,自动化的冲压设备对提高生产效率起着至关重要的作用,同时也使冲压模具的效能得到充分发挥,目前冲压设备正朝着多工位、多功能、高速和数控方向发展;另一方面,电气控制技术、光电控制技术的应用以及自动机械机构、机械手甚至机器人的使用,也大幅提高了冲压生产的自动化程度,使冲压生产的效率大大提高,并确保了劳动安全。

1.2 冷冲压模具及模具零件的分类

冲压模具是冲压工艺方案的具体实现,冲压模具的结构形式对冲压件的质量与精度,冲压加工的生产效率与经济效益、模具的使用寿命与操作安全都有着重要的影响,必须综合适应各方面的条件。

1.2.1 冷冲压模具的分类

冷冲模一般按以下几种方式进行分类。

1. 按工序性质

冲压加工的各类零件其形状、尺寸和精度要求各不相同,因而生产中采用的冲压工艺方法也是多样的。概括起来,按其冲压工序的性质可以将冷冲压模具分为以下几类。

冲裁模——使材料分离,得到所需形状和尺寸制件的冲模,主要包括落料模、冲孔模、切边模、切边模、半精冲模、精冲模以及整修模等。

弯曲模——将毛坯或半成品制件沿弯曲线弯成一定角度和形状的冲模。

拉深模——将板料成形为空心件,或者使空心件进一步改变形状和尺寸,而料厚没有明显变化的冲模。

成形模——使板料发生局部塑性变形,按凸模与凹模的形状直接复制成形的冲模,如翻边模、胀形模、缩口模等。

2. 按工序组合程度

在实际生产中,根据冲压件生产批量、尺寸及公差要求,通常会在工艺上对基本工序进行一定的组合,以提高生产效率。因此,按工序组合程度可将冲压模具分为以下几类。

单工序模——在压力机的一次行程中只完成一道冲压基本工序的冲模,如落料模、冲孔模、弯曲模、拉深模等。

复合模——在压力机的一次行程中,同一工位上同时完成两道或两道以上冲压基本工序的冲模,如冲孔落料复合模、落料拉深复合模等。

级进模——在压力机的一次行程中,依次在模具的不同工位上完成多道基本工序的冲模,又称为连续模。如冲孔落料级进模。

另外,按有无导向或导向类型,冲压模具又可分为有导向冲模和无导向冲模、导柱导向冲模和导板导向冲模;根据送料和出件方式又可分为手动模、半自动模和自动模;还可根据工作零件的材料分为钢质冲模、硬质合金冲模、锌基合金冲模、橡胶冲模等。

1.2.2 冲压模具零件的分类

任何一副冲压模具都是由各种不同的零部件组成的,根据其复杂程度,可以由几个零件组成,也可以由几十个甚至上百个零件组成。

1. 冲压模具的结构组成

一般来说,冲压模具都是由上模和下模两个部分组成。上模通过模柄或上模座固定在压力机的滑块上做上下往复运动,是冲模的整体活动部分;下模通过下模座固定在压力机的工作台面或垫板上,是冲模的固定部分。

如图 1-1 所示为一副简单落料模。下模部分由下模座 9、导柱 13、凹模 8、挡料销 6、导料销 14、销钉 12、顶件块 7、顶杆 11、弹顶器 10 以及其他紧固零件组成;上模部分包括上模座 1、导套 15、模柄 19、垫板 2、固定板 3、凸模 4、卸料板 5、卸料螺钉 20 以及弹簧 16、销钉 17、18 和其他紧固件。上模随着压力机滑块做上下往复运动,在条料上依次冲出制件,并在弹顶器 10 和顶杆 11 的作用下,由顶件块 7 将制件顶出凹模。

2. 冲压模具零部件的分类

根据冷冲压模具各零部件在模具中所起的作用,可将其分为工艺零件和结构零件两大类,其详细分类及作用如表 1-3 所示。

从加工工艺角度考虑,根据冲压模具零件的结构形状特征,又可将其分为杆类零件、套类零件、板类零件和复杂结构及型面类零件四类。

杆类零件有导柱、简单而较规则的凸模以及顶杆、推杆等,它们往往有较高的尺寸精度和诸如圆柱度、圆度、同轴度等形状和位置精度要求。

套类零件包括导套、镶套、凹模套等,它们的共性是内孔和外圆的形状、尺寸精度及其同轴度要求高。

板类零件在冲压模具中比较多,如固定板、卸料板、凹模板、垫板、模座、推板等。板类零件常带孔系结构,其精度要求主要包括:上、下平面的平面度及其平行度,各孔的形状尺寸和坐标尺寸精度,孔系轴线对平面的垂直度等。

第2章

药物的化学结构与生物活性

学习要求

1. 掌握药物的理化性质、键合特性、立体结构及官能团对药效的影响；掌握电子等排原理、前药原理和软药原理。
2. 熟悉药物的化学结构与体内生物转化的关系；熟悉药物化学结构修饰的方法。
3. 了解药物在体内的作用过程。

药物分子在体内的作用过程通常分成三个时相，即药剂相（pharmaceutical phase）、药代动力相（pharmacokinetic phase）和药效相（pharmacodynamic phase）。药剂相是药物在体内作用的初始过程，决定用药的效率。药代动力相可分为吸收、分布、生物转化和排泄四个阶段，构成了机体在时间和空间上对药物的作用和处置。药效相是药物在作用部位与受体发生相互作用，通过刺激或放大作用、级联反应或直接引发生物体的物理或化学变化，导致宏观上可以观测到的药效或毒性效应。当药物与疾病相关的靶标发生作用，产生所希望的药效，获得治疗效果；如与正常组织作用，则产生不希望的不良反应，即毒性。

影响这三个时相最根本的因素则是药物的化学结构，化学结构决定药物的生物活性。通过对药物化学结构改造和修饰，可以改善药物的吸收情况，延长药物的作用时间，降低毒副作用，提高药物生物利用度。研究药物化学结构与生物活性的内在关系，又称为构效关系（structure-activity relationship, SAR），是药物化学中一项重要内容。

第1节 药物的化学结构与药效

药物按作用方式可分为结构特异性药物和结构非特异性药物。结构非特异性药物的药理作用主要受理化性质影响而与化学结构类型关系较少。结构特异性药物的药理作用依赖于药物分子特异的化学结构，该化学结构与受体相互作用后才能产生生物活性，因此化学结构的变化会直接影响其药效。大部分药物属于结构特异性药物。

药物在体内的药效主要决定于两个因素：一是药物在作用部位的浓度；二是药物和受体的相互作用。药物必须以一定浓度到达作用部位才能产生药效。药物在体内的转运