

<<信息化学实验导论>>

图书基本信息

书名：<<信息化学实验导论>>

13位ISBN编号：9787030289032

10位ISBN编号：703028903X

出版时间：2010-9

出版时间：科学出版社

作者：詹豪强

页数：327

版权说明：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：<http://www.tushu007.com>

## &lt;&lt;信息化学实验导论&gt;&gt;

## 前言

从科学史看,科学数据的大量积累往往导致重大科学规律的发现。

19世纪60年代,化学积累了数十种元素和上万种化合物数据,门捷列夫(1834-1907)把这些元素按相对原子质量大小次序排列,发现其化合物性质发生周期性的变化,于1869年提出元素周期律(信息化学史上的重大里程碑),为发现新元素和玻尔(Niels-Enrik David Bohr, 1885-1962)建立原子模型指明了方向。

20世纪30年代,人们积累了100多万种化合物数据,结合量子化学成就,导致鲍林(L. Pauling, 1901-1994)提出共价、电价和氧化值概念,以及d键、7c键、杂化轨道、电负性、共振结构等概念,总结出化学键理论,对20世纪化学的发展起了重要作用。

因此,有理由相信,当今海量化学数据的积累,也将导致重大化学规律的发现(徐光宪,2001)。

如果说数据挖掘是继网络之后新的经济增长点,生物信息学是继IT技术之后新的投资点,那么,信息化学将会继生物信息学之后,成为科学研究领域的新牵头学科。

组合化学和高通量筛选为药物研制提供了新技术支持,同时也给信息化学的发展提供了良机。

药物设计上,信息化学至少面临两方面挑战:如何更好地识别与表达有机小分子的化学信息,尤其是与生物活性、毒性相关的立体结构信息,更有效地发掘构效关系、选出类先导(leadlike)或类药(druglike)结构,将其用作配体进行组合化学衍生与高通量筛选;开放式研究机制,包括采用开源软件与建设公共数据库。

药物与受体相互作用过程,首先是分子识别问题。

人类若想延长生命,就要奇迹般地控制人体组织中的分子,但弄清这个问题比控制分子更重要。

计算机技术是目前信息化学的基本实验工具,原属于计算机专业理论领域的诸多抽象概念和先进模型已成为实用的计算机应用技术,并成为与生物、化学和药学等领域相互交叉、影响和促进的高新技术增长点和前沿应用领域。

当前,信息化学在国内外的的发展基本上都处于起步阶段,各国所拥有的条件也大体相同。

在条件具备的大学里建立信息化学专业或化学系开设信息化学课,培养跨学科的专业技术人才,以满足我国将出现的对信息化学专业人才不断增长的就业市场需求。

通过对化学实验数据(包括计算化学数据)的获取、加工、存储、检索与分析,进而揭示数据所蕴含的化学意义。

化学信息已然深入到化学、化工的方方面面,超分子化学、蛋白质工程、药物化学、绿色化学、环境化学、脑化学、材料化学为信息化学提供了蓬勃发展的契机,创造了施展身手的空间。

## <<信息化学实验导论>>

### 内容概要

信息化学学科的建立得益于化学数据的长期积累与近代数学的进步以及计算机与网络技术的发展,利用计算机网络整合化学数据库资源与CPU计算资源,旨在探索与揭示化学现象传递出的复杂性信息。信息化学实验技术包括系统分析与设计, J2SE、XML与J2EE编程, 网络与服务器操作系统, 数据库设计, 数据仓库及其挖掘技术和并网集群计算等。

本书涉及的信息化学实验有化学模拟计算、化学结构可视化编程、化学数据挖掘与知识发现及分子动漫与高分子信息化学实践。

21世纪, 化学的诸多领域, 如生命工程、药物开发、绿色农药、环境化学、脑科学、碳计算机化学合成与材料分子工程等, 会因为信息化学的参与而多姿多彩。

本书可供高等学校化学专业和应用化学专业使用, 也可供从事与化学研发有关的IT人士参考。

## <<信息化学实验导论>>

### 书籍目录

前言引言 化学现象传递的复杂性信息技术篇 第1章 系统分析与设计 第2章 Java编程语言 第3章 网络与服务器操作系统 第4章 可扩展标记语言:XML 第5章 J2EE网络框架 第6章 数据库技术 第7章 数据仓库及其挖掘技术 第8章 集群计算实践篇 第9章 计算化学 第10章 化学结构可视化编码技术 第11章 化学数据挖掘 第12章 分子动漫与高分子信息化学实验进展主要参考文献

## 章节摘录

插图：纯度是化学家追求的目标之一，然而不纯所造成的复杂性却为实际应用带来了广阔前景。半导体及1986年以来的高温超导体都是在纯度上做文章，由于不纯“连续”变化，有可能在性能上出现新的“大起大落”。

这样一来，在新材料开发方面，不纯比纯更成为研究的方向。

当然，问题不是盲目地撞大运，而是能有效地控制“杂质”，半导体（包括导电高分子）的历史说明了这点。

事实上，过去的材料从金属材料、无机材料到有机高分子材料及其复合材料，都是在技术上改进质量控制和生产过程控制，距离“科学”很远。

材料科学与技术取得发展并成为独立学科后，为实现某项技术要求材料功能，将有关组分按一定比例与方式组合。

在各组分功能已知的情况下，新功能的实现就仅是这些组分的合理配伍了。

在这个领域中，配方的设计对于复合材料性能产生巨大影响，成为信息化学与分子工程学研究的一项内容（高分子反应采用反应动力学数学模型方法模拟，高分子形态主要用Monte Carlo方法模拟）。

设计具有特定优异性能的高分子材料（如航天材料）还有相当难度，是分子设计的一个方向。

环境科学向化学提出的基本问题，已从早期的分析监测方法和环境治理方法转向环境过程研究。

环境过程化学：环境化学过程的跟踪、分析、模拟与预测。

环境生物化学：研究天、地、生物间相互作用的基本化学反应，尤其是人和生物对外来物质与能量所做的应答，以及人类生活、生产活动对环境影响的化学评价。

生态环境中，往往有种类繁多、形态复杂、性质各异、含量极微的化学物质。

这些活性化合物间相互作用错综复杂，既有线性变化，又有非线性变化，或介乎于线性与非线性间的变化；既有化学变化，又有生物变化。

## <<信息化学实验导论>>

### 编辑推荐

《信息化学实验导论》是由科学出版社出版的。

<<信息化学实验导论>>

版权说明

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:<http://www.tushu007.com>