

<<分子设计导论>>

图书基本信息

书名：<<分子设计导论>>

13位ISBN编号：9787040086119

10位ISBN编号：7040086115

出版时间：2000-1

出版时间：北京蓝色畅想图书发行有限公司（原高等教育出版社）

作者：俞庆森,朱龙观

页数：170

字数：200000

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>

## <<分子设计导论>>

### 内容概要

本书教育部“高等教育面向21世纪教学内容和课程体系改革计划”的研究成果，是面向21世纪课程教材。

本书较系统地介绍了分子设计的基本原理、方法和应用领域。

全书共11章，内容包括：量子化学从头计算方法与半经验计算方法、构象分析、数据库分类、分子设计中的参数、分子设计中的建模方法、分子图形学、药物分子设计、蛋白质分子设计、催化剂分子设计、高分子分子设计等。

每章附有20篇左右参考文献。

本书适用于化学、应用化学、药物化学、材料科学、高分子化学、生物化学等专业的本科生、研究生作教材或参考书，也可供从事分子设计研究有关的科研人员参考。

## &lt;&lt;分子设计导论&gt;&gt;

## 书籍目录

第一章 绪言 1.1 分子设计的含义 1.2 分子设计的意义 1.3 分子设计的过程第二章 量子化学从头计算与半经验计算 2.1 量子化学从头计算 2.2 量子化学半经验计算第三章 构象分析 3.1 结构、构造、构型和构象的概念 3.2 不同含义构象的几个概念 3.3 构象确定的复杂性 3.4 构象分析方法 3.5 局部最低与能量最低构象的取舍 3.6 构象优化与晶体结构 3.7 构象分析的几个例子 3.8 分子溶液构象的搜寻方法 3.9 柔性构象数据库的搜寻方法第四章 数据库和专家系统 4.1 数据库分类 4.2 现代化学数据库的特征 4.3 数据库的作用 4.4 化学数据库举例 4.5 数据库在分子设计中的应用 4.6 专家系统 4.7 APEX-3D简介第五章 分子设计中的参数 5.1 典型结构参数 5.2 拓扑指数 5.3 量子化学参数 5.4 三维类参数第六章 分子设计中的建模方法 6.1 模式识别建模 6.2 PLS建模 6.3 逻辑结构分析建模 6.4 集合论方法建模 6.5 人工神经网络建模方法 6.6 距离几何学建模 6.7 计算机结构建模第七章 分子图形学 7.1 分子图形学的基本方法 7.2 分子图形学应用软件第八章 药物分子设计 8.1 常规药物分子设计 8.2 三维结构搜寻的药物分子设计 8.3 全新药物分子设计第九章 蛋白质分子设计 9.1 蛋白质的一些基本知识 9.2 蛋白质结构预测 9.3 蛋白质分子设计第十章 催化剂分子设计 10.1 催化剂分子设计的困难 10.2 催化剂分子设计中的复合效应 10.3 催化剂分子设计分类第十一章 高分子分子设计 11.1 高分子结构知识 11.2 高分子分子设计的主要方法索引

<<分子设计导论>>

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>