

<<简明计算机化学教程>>

图书基本信息

书名：<<简明计算机化学教程>>

13位ISBN编号：9787310023271

10位ISBN编号：7310023277

出版时间：2005-8

出版时间：南开大学出版社

作者：乔园园/张明涛主编

页数：191

字数：315000

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>

<<简明计算机化学教程>>

内容概要

计算机化学 (Computer chemistry) 是应用计算机技术来进行化学研究的科学。

本书围绕着“化学信息”这一核心,从计算机化学的基本概念、方法入手,将实验数据、量测信号、谱图、分子结构、化学知识和Internet这一系列看似零散但却有着内在联系的内容串联起来,展现了计算机化学在数据处理、信号分析、结构解析、有机合成、分子设计等诸多方面的应用。

本书可供化学、化工、生物等相关专业人员和高等院校相关专业师生参考。

<<简明计算机化学教程>>

书籍目录

第一章 实验数据的统计分布 第一节 误差 第二节 统计分布 第三节 置信区间 第四节 统计检验第二章 实验数据的回归分析 第一节 一元线性回归分析 第二节 多元线性回归分析第三章 化学信号的数据处理 第一节 有用信号与噪声信号 第二节 滤波 第三节 平滑 第四节 微分 第五节 拟合 第六节 积分第四章 实验数据的主成分分析 第一节 数据的预处理 第二节 随机向量的数字特征 第三节 矩阵特征直、特征向量及其Jacobi解法 第四节 主成分分析第五章 分子拓扑结构 第一节 分子拓扑结构的表示 第二节 分子通式结构 第三节 分子结构片段第六章 分子结构参数 第一节 物理化学参数 第二节 拓扑指数 第三节 量子化学参数 第四节 构效关系模型第七章 计算机辅助结构解析 第一节 谱图数据库 第二节 计算机辅助结构解析第八章 计算机辅助有机合成设计 第一节 有机合成反应的表示方法 第二节 计算机辅助有机合成设计系统第九章 计算机辅助分子设计 第一节 药物作用的基本理论 第二节 药物分子设计的基本过程 第三节 药物分子设计的有关技术 第四节 药物分子设计的基本方法第十章 化学信息与Internet 第一节 Internet服务 第二节 搜索引擎 第三节 网上化学信息参考文献附录索引

<<简明计算机化学教程>>

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>