

<<定量构效关系及研究方法>>

图书基本信息

书名：<<定量构效关系及研究方法>>

13位ISBN编号：9787560320731

10位ISBN编号：7560320732

出版时间：2004-9

出版时间：哈尔滨工业大学出版社

作者：王鹏

页数：195

字数：30000

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>

<<定量构效关系及研究方法>>

内容概要

本书系统阐述了有机化合物定量构效关系及研究方法。

全书由五章构成，分别介绍了定量构效关系的概念模式及环境科学领域应用研究的现状；定量构效关系研究中的分子结构数学表征方法，重点讨论了以分子连接性指数和自相关拓扑指数为代表的分子拓扑指数及研究方法；定量构效关系研究中的数学建模方法，重点讨论了回归分析和人工神经网络方法等。

本书以定量构效关系研究方法分类成章，每章内容系统详尽，各章之间既相互联系，又相互独立自成体系；既体现了国内外在该领域的最新研究现状和前沿，又融入了作者本人的研究生课题工作成果，兼顾作为教材的系统性要求，具有较好的针对性、系统性和实用性以及较高的学术价值。

本书可作为高等学校环境科学与工程、化学、药学及其相关专业的教学用书，亦可作为相关领域的广大科技工作者的参考书和应用工具书。

<<定量构效关系及研究方法>>

书籍目录

第1章 有机物定量构效关系 1.1 定量构效关系及研究现状 1.1.1 定量构效关系 1.1.2 定量构效关系研究的发展历程 1.1.3 定量构效关系研究现状及分析 1.1.4 定量构效关系在环境科学研究中的应用 1.2 定量构效关系的概念模式及研究方法 1.2.1 结构参数的选择 1.2.2 活性参数的获得 1.2.3 定量构效关系模型 1.2.4 定量构效关系模型的求解方法 1.2.5 定量构效关系模型的检验、优化和误差估计 1.3 定量构效关系研究中的分子结构参数 1.3.1 辛醇 - 水分配系数 1.3.2 Hammett 取代基常数 1.3.3 瞰取代基常数 1.3.4 分子折射率 1.3.5 量子化学参数 1.3.6 分子拓扑指数 1.3.7 其他结构参数第2章 环境科学研究中的定量构效关系 2.1 污染物化学降解过程的定量构效关系 2.1.1 水解过程中的定量构效关系 2.1.2 电离过程中的定量构效关系 2.1.3 光化学反应中的定量构效关系 2.1.4 高级氧化反应中的定量构效关系 2.1.5 大气自由基化学反应中的定量构效关系 2.1.6 还原反应中的定量构效关系 2.2 污染物生物降解过程的定量构效关系 2.2.1 污染物分子结构 - 生物可降解性定量关系模型 2.2.2 有机污染物好氧生物降解中的定量构效关系 2.2.3 有机污染物厌氧生物降解中的定量构效关系 2.3 环境毒理学中的定量构效关系 2.3.1 污染物质富集和累积过程中的定量构效关系 2.3.2 有机污染物生物毒性的定量构效关系 2.3.3 污染物质毒性学效应的定量构效关系 2.3.4 芳香烃类有机物毒理学效应的定量构效关系 2.3.5 金属化合物毒理学效应的定量构效关系 2.4 生物毒性快速检测技术研究 2.4.1 基本原理 2.4.2 有机化学品对酵母菌毒性的测定方法 2.4.3 实验条件的优化 2.4.4 取代苯对酵母菌的最小抑制圈浓度Cmiz的测定 2.4.5 Cmiz同LC50的相关性研究第3章 分子拓扑指数及研究方法 3.1 分子拓扑学基础 3.1.1 拓扑性质与拓扑不变量 3.1.2 分子图的基本概念和术语 3.2 分子拓扑指数研究方法 3.2.1 分子结构的图形化 3.2.2 分子图的矩阵表示 3.2.3 分子结构的数值化 3.3 分子连接性指数及程序设计研究 3.3.1 分子连接性指数 3.3.2 分子连接性指数的程序化设计 3.3.3 分子连接性指数的应用 3.4 点价自相关拓扑指数及程序设计研究 3.4.1 点价自相关拓扑指数 3.4.2 点价自相关拓扑指数的程序化设计 3.4.3 点价自相关拓扑指数的应用第4章 定量构效关系研究中的数学方法 4.1 回归分析 4.1.1 一元线性回归 4.1.2 多元回归分析 4.1.3 逐步回归分析 4.2 多元统计分析方法 4.2.1 主成分分析 4.2.2 因子分析 4.2.3 聚类分析 4.2.4 判别分析 4.2.5 模式识别 4.2.6 计算举例第5章 人工神经网络方法参考文献

<<定量构效关系及研究方法>>

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>