

分子结构.性质与活性



[分子结构.性质与活性_下载链接1](#)

著者:王连生

出版者:化学工业出版社

出版时间:1901-01-01

装帧:

isbn:9787502518660

本书是继《有机物定量结构-活性相关》的第二本专著，是该领域理论与应用的姐妹篇，也是我们近几年承担国家自然科学基金的研究工作总结。全书共分十章，书中不仅介绍了分子结构、性质与活性的测定方法，而且还提供了有机物理化性质及生物活性的估算方程；并以相当篇幅叙述了量子化学、拓扑指数、分子官能团贡献法、神经网络技术以及一种新的Lewis酸碱判别指数在定量结构、性

作者介绍:

目录: -第一章
结构、性质与活性
1. 1
结构-性质研究发展过程
1. 2
化学键模型与分子结构的表示
1. 3
结构对物理化学性质的影响

1. 4

结构-性质相关预测水中溶解度

1. 5

分子连接性指数与硝基芳烃理化参数的相关性

1. 6

结构-怀质相关估算土壤-沉积物吸附系数

1. 7

应用结构-性质相关研究有机物的亨利常数

1. 8

摩尔体积与理论参数相关性

1. 9

结构与

• • • • • (收起)

[分子结构.性质与活性_下载链接1](#)

标签

评论

[分子结构.性质与活性_下载链接1](#)

书评

[分子结构.性质与活性_下载链接1](#)