

<<化学信息学>>

图书基本信息

书名：<<化学信息学>>

13位ISBN编号：9787502574307

10位ISBN编号：7502574301

出版时间：2010-7

出版时间：化学工业出版社

作者：陈明旦

页数：295

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;化学信息学&gt;&gt;

## 前言

化学信息学是一门化学、化工与信息科学、计算机科学交叉的新兴学科，它采用信息学方法来解决化学问题。

由于计算机和网络已经广泛地应用到各个化学研究领域，许多化学研究学科都与化学信息密切相关。大量的传统学科与信息科学结合发展成为新兴的边缘学科，共同构成了信息化社会的基础。

近年来，借助于计算机和网络技术，在化学实验中使用大量的新仪器和新方法，从而得到了大量的实验数据。

信息的急剧膨胀与人们有限的学习时间及吸收能力形成了巨大的矛盾，反过来又要求使用计算机和网络技术对海量信息进行高速和精确的处理和利用，对化学信息处理提出更高和更迫切的要求，以达到产生和处理的相对平衡。

化学信息的收集、处理、管理和利用，必不可少地要借助信息学的方法和技术。

于是，化学信息学随着计算机在化学中的广泛应用和化学信息网络化的不断发展而引起化学家的广泛关注和高度重视。

今天，化学信息学已经成为药物和生命科学研究不可缺少的热门工具。

正是由于人们认识到化学信息学对于现代化学研究的重要性，近年来国外部分大学正尝试在化学教育中系统地增加化学信息学课程。

化学信息学的发展将推动传统的化学教育模式的改革。

2003年德国的Johann Gasteiger和Thomas Engel出版了“Chemoinformatics A Textbook”一书，该教科书系统、全面、深入浅出地介绍了化学信息学的各个研究领域及其研究现状和今后的发展动向。

最近，梁逸曾等已经将该书翻译为《化学信息学教程》，由化学工业出版社出版。

在国内，化学信息学的教学已经引起高度的重视，中国教育部理科化学教学指导委员会已将化学信息学列入高等学校化学专业和应用化学专业的化学教学基本内容。

目前，已经有多所大学都已开设化学信息学或相关的课程，并出版了数种化学信息学教材。

化学信息学作为一门新的教学课程，其课程的要求、内容、教学方式和教材等是课程建设的一项新任务。

国外化学信息学的教学侧重于专业方向教学，交叉性强，涵盖广。

在国内，化学信息学是化学系各专业方向的必修课程之一，由于课时的限制，其教学内容多侧重于化学文献学，其他的相关内容多分别归属于另外的课程，并已经另有专著出版。

本书以化学信息资源检索和化学结构信息可视化为重点，强调现代数据库检索技术的使用，全面地介绍了数据库检索的基础知识、常用文摘数据库、常用全文数据库、常用电子期刊、特种信息资源和常用化学事实数据库等内容。

另外，本书重点介绍了化学结构的表示和可视化、分子模型的构建及著名的分子图形软件的使用。

为了教学的需要，本书也介绍了重要的印刷类化学文献信息。

本书内容新颖，所介绍的应用软件大多是目前的最新版本，包括 Chem3D 9.0、ChemDraw 9.0、HyperChem 7.52、Adobe Acrobat 7.01、Reference Manager 11、EndNote 8.02、DS ViewerPro 5.0和MDL CrossFire Commander 7.0等功能强大的著名软件。

在本书所介绍的内容中，Reference Manager和EndNote是著名的文献管理软件，MDL CrossFire Commander 7.0是著名的Beilstein/Gmelin数据库检索平台，Current Contents是ISI的低价位产品，而DS ViewerPro和HyperChem均是优秀的三维分子图形软件。

对它们的使用，目前鲜有详细和全面的介绍。

另外，本书详细介绍了CA on CD和Web of Science的使用。

多数高等院校师生可方便地使用本书所介绍的大部分数据库、电子期刊和分子图形软件。

本书具有较强的实用性和普及性，可作为高等院校的化学、化工和材料及相关专业本科生、研究生的教材，也可供科学研究工作者、专业技术人员和图书情报工作者了解和掌握信息检索与管理等相关知识学习参考。

<<化学信息学>>

本书在编写过程中得到厦门大学化学系周朝晖教授、李耀群教授和厦门大学网络中心郭嘉老师的指正，也得到化学工业出版社的热心支持和大力帮助，化学系本科生杨静、陈善慈等同学帮助进行部分素材的制作，在此表示衷心的感谢。

由于时间短促，书中难免存在遗漏和不妥之处，敬请读者批评指正。

## <<化学信息学>>

### 内容概要

《化学信息学》以化学信息资源检索和化学结构信息可视化为重点，强调现代数据库检索技术的使用，全面地介绍了化学信息与数据库检索的基础知识、常用文摘数据库、常用全文数据库、常用电子期刊、特种信息资源、常用化学事实数据库及文献数据的管理等内容。

另外，《化学信息学》重点介绍了化学结构的表示和可视化、分子模型的构建及著名的分子图形软件的使用。

为了教学的需要，本书也介绍了重要的印刷类化学文献信息。

《化学信息学》内容新颖，实用性强，适用面广，可作为高等院校有关专业的本科生、研究生教材，也可作为科学研究工作者、专业技术人员和图书情报工作者了解掌握信息检索与管理的学习参考。

## 书籍目录

第一章 化学信息概论第一节 化学信息与化学信息学一、化学信息学的产生和发展二、化学信息学的研究领域三、信息资源检索的意义与作用四、化学信息学的课程内容第二节 电子信息和数据库一、电子信息二、数据库三、在线化学数据库第三节 信息检索的方法和步骤一、信息检索方法二、信息检索效果的评价三、信息检索技术四、信息检索步骤第二章 印刷类化学文献信息第一节 图书分类法简介一、图书馆的重要地位和作用二、图书馆图书的分类系统第二节 重要工具书、专著和大全一、工具书二、专著和大全第三节 重要化学期刊简介一、综合性自然科学期刊二、化学学科综合性期刊三、专业性化学期刊四、综论类期刊第四节 化学文摘 (Chemical Abstracts) 一、CA类目二、文摘编排顺序和格式三、文摘著录内容和格式四、CA中的索引五、CA检索的注意事项第三章 常用文摘数据库第一节 ISI数据库一、ISI数据库简介二、科学引文索引 (SCI) 三、Web of Knowledge第二节 Current Contents数据库一、数据简介二、浏览文献三、检索文献四、检索结果及处理第三节 Web of Science数据库一、数据库简介二、数据库检索三、检索结果及处理第四节 INSPEC数据库一、数据库简介二、数据库检索第五节 BIOSIS Previews数据库一、数据库简介二、数据库检索第六节 Chemical Abstract数据库一、化学文摘社 (CAS) 二、CA on CD数据库第七节 EI Village 2数据库一、数据库简介二、数据库检索三、检索结果及处理第四章 常用全文数据库第一节 ProQuest数据库一、数据库简介二、数据库检索三、检索结果及处理第二节 EBSCO数据库一、数据库简介二、数据库检索三、检索结果及处理第三节 Science Direct数据库一、数据库简介二、期刊浏览和检索三、数据库检索四、检索结果及处理第四节 中国期刊全文数据库一、数据库简介二、数据库专刊目录三、数据库检索四、检索结果及处理第五节 万方数据化期刊一、数据库简介二、数据库检索第五章 常用电子期刊第一节 Elsevier Science Onsite一、概述二、浏览三、检索方法四、检索结果及处理第二节 SpringerLink一、概述二、浏览三、检索方法四、检索结果及处理第三节 Wiley InterScience一、概述二、浏览三、检索方法四、检索结果及处理第四节 Kluwer Online一、概述二、浏览三、检索方法四、检索结果及处理第五节 American Chemical Society一、概述二、浏览三、检索方式四、检索结果及处理第六节 Royal Society of Chemistry一、概述二、浏览三、检索方法四、检索结果及处理第七节 American Institute of Physics一、概述二、浏览三、检索方法四、检索结果及处理第八节 PDF文档的创建一、Adobe Acrobat简介二、PDF文档的特点三、PDF文档的创建四、Adobe Acrobat的其他功能第六章 特种信息资源第一节 专利数据库一、专利基础二、中国专利数据库三、美国专利数据库四、欧洲专利数据库第二节 会议文献检索 (ISI Proceedings) 一、会议文献概述二、ISI Proceedings的使用第三节 学位论文检索一、PQDD博硕士学位论文二、CALIS学位论文库第四节 论文评价与引文索引检索一、论文评价二、引文索引三、期刊引文报告 (Journal Citation Reports) 第五节 Reference Manager的使用一、RM简介二、文献数据的导入三、RM的检索四、RM与Microsoft Word的结合使用第六节 EndNote的使用一、EndNote简介二、EndNote文献库的操作三、EndNote的文献数据导入四、EndNote的在线检索五、EndNote和Word结合使用第七章 常用化学事实数据库第一节 CrossFile Beilstein/Gmelin的使用一、数据库简介二、检索程序界面三、数据库检索四、检索结果及处理五、应用实例第二节 NIST Chemistry WebBook一、数据库简介二、数据库检索三、检索结果及处理第三节 科学搜索引擎SCIRUS一、概述二、检索方法三、检索结果及处理第八章 化学结构的可视化第一节 化学结构的表示和可视化一、化学结构的表示二、二维化学结构的表示和可视化三、三维化学结构的表示和可视化四、大分子化学结构的表示和可视化五、分子表面的显示六、化学结构的网络表示第二节 ISIS/Draw的使用一、简介二、操作界面三、分子结构图的绘制四、电子转移和原子特征的表示五、化学反应式的绘制六、其他功能第三节 ChemDraw的使用一、简介二、操作界面三、二维分子结构的绘制四、其他功能第九章 三维分子模型设计第一节 分子力学和分子建模一、分子力学基本原理二、分子力场参数化三、三维分子模型的构建第二节 DS ViewerPro的使用一、简介二、操作界面三、分子模型的绘制四、分子模型的显示五、其他功能第三节 Chem3D的使用一、简介二、操作界面三、分子模型的操作四、分子模型的构建五、分子结构数据的测定六、分子的计算七、分子表面和分子轨道图形的显示第四节 HyperChem的使用一、简介二、工具栏的使用三、菜单命令四、使用实例参考文献



<<化学信息学>>

编辑推荐

其它版本请见：《化学信息学（第2版）》

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>