第一图书网, tushu007.com

<<化学信息学>>

图书基本信息

书名：<<化学信息学>>

13位ISBN编号：9787122104120

10位ISBN编号：7122104125

出版时间：2011-3

出版时间：陈明旦、 谭凯 化学工业出版社 (2011-03出版)

作者：陈明旦，谭凯 著

页数：274

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

第一图书网, tushu007.com

<<化学信息学>>

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关联。
大量的传统学科与信息科学结合发展成为新兴的边沿学科，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JohannGasteiger和ThomasEngel出版了“ ChemoinformaticsATextbook ”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。
2004年，梁逸曾等将该书翻译成中文版，即《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了高度重视，我国教育部化学类专业教学指导分委员会已将化学信息学列入高等学校化学类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，化学信息学作为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。

第一图书网, tushu007.com

<<化学信息学>>

内容概要

《化学信息学（第2版）》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（第2版）》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（第2版）》内容新颖，实用性强，适用面广，可作为高等院校有关专业本科生、研究生的教材，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。

第一图书网, tushu007.com

<<化学信息学>>

书籍目录

第一章 化学信息概论 1 第一节 化学信息与化学信息学 1一、化学信息学的产生和发展 1二、化学信息学的研究领域 2三、信息资源检索的意义与作用 3四、化学信息学的课程内容 4第二节 电子信息和数据库 5一、电子信息 5二、数据库 6三、在线化学数据库 8第三节 信息检索的方法和步骤 13一、信息检索方法 13二、信息检索效果的评价 14三、信息检索技术 15四、信息检索步骤 17 第二章 印刷类化学文献信息 22 第一节 图书分类法简介 22一、图书馆的重要地位和作用 22二、图书馆图书的分类系统 22第二节 重要工具书、专著和大全 24一、工具书 25二、专著和大全 27第三节 重要化学期刊简介 29一、综合性自然科学期刊 30二、化学学科综合性期刊 30三、专业性化学期刊 31四、综论类期刊 34第四节 化学文摘（Chemical Abstracts） 35一、CA类目 36二、文摘编排顺序和格式 37三、文摘著录内容和格式 37四、CA中的索引 40五、CA检索的注意事项 42 第三章 常用文摘数据库 44 第一节 ISI数据库 44一、ISI数据库简介 44二、科学引文索引（SCI） 45三、Web of Knowledge 46第二节 Current Contents数据库 52一、数据库简介 52二、浏览文献 52三、检索文献 55四、检索结果及处理 58第三节 Web of Science数据库 61一、数据库简介 61二、数据库检索 62三、检索结果及处理 66第四节 INSPEC数据库 69一、数据库简介 69二、数据库检索 70第五节 BIOSIS Previews数据库 72一、数据库简介 72二、数据库检索 72第六节 Chemical Abstract数据库 74一、化学文摘社（CAS） 74二、CA网络版（SciFinder Scholar）数据库 76第七节 EI Village 2数据库 85一、数据库简介 85二、数据库检索 85三、检索结果及处理 88 第四章 常用全文数据库 91 第一节 ProQuest数据库 91一、数据库简介 91二、数据库检索 92三、检索结果及处理 93第二节 EBSCO数据库 94一、数据库简介 94二、数据库检索 95三、检索结果及处理 97第三节 Science Direct数据库 98一、数据库简介 98二、期刊/书籍浏览 99三、数据库检索 99四、检索结果及处理 101第四节 中国期刊全文数据库 102一、数据库简介 102二、数据库专栏目录 102三、数据库检索 103四、检索结果及处理 104第五节 万方数据化期刊 106一、数据库简介 106二、数据库检索 106 第五章 常用电子期刊 109 第一节 SpringerLink 109一、概述 109二、浏览 109三、检索方法 110四、检索结果及处理 110第二节 Wiley InterScience 111一、概述 111二、浏览 112三、检索方法 113四、检索结果及处理 113第三节 Kluwer Online 116一、概述 116二、浏览 116三、检索方法 117四、检索结果及处理 118第四节 American Chemical Society 118一、概述 118二、浏览 119三、检索方法 119四、检索结果及处理 120第五节 Royal Society of Chemistry 121一、概述 121二、浏览 121三、检索方法 122四、检索结果及处理 122第六节 American Institute of Physics 122一、概述 122二、浏览 123三、检索方法 123四、检索结果及处理 124 第六章 特种信息资源 126 第一节 专利数据库 126一、专利基础 126二、中国专利数据库 128三、美国专利数据库 129四、欧洲专利数据库 134五、专利搜索引擎——Google Patent（谷歌专利） 136第二节 会议文献检索（Proceedings） 138一、会议文献概述 138二、会议录引文索引（Conference Proceedings Citation Index） 138三、中国重要会议论文全文数据库 139第三节 学位论文检索 141一、PQDD博硕士学位论文数据库 141二、CALIS学位论文库 142三、中国博士学位论文和优秀硕士学位论文全文数据库 143第四节 论文评价与引文索引检索 144一、论文评价 144二、引文索引 144三、期刊引文报告（Journal Citation Reports） 145第五节 Reference Manager的使用 148一、RM简介 148二、文献数据的导入 149三、RM的检索 150四、RM与Word的结合使用 153第六节 EndNote的使用 155一、EndNote简介 155二、EndNote文献库的操作 156三、EndNote文献数据的导入 158四、EndNote的在线检索 159五、EndNote与Word的结合使用 161 第七章 常用化学事实数据库 164 第一节 CrossFire Beilstein/Gmelin 的使用 164一、数据库简介 164二、检索程序界面 165三、数据库检索 166四、检索结果及处理 170五、应用实例 171第二节 NIST Chemistry WebBook 176一、数据库简介 176二、数据库检索 177三、检索结果及处理 178第三节 谷歌学术搜索（Google Scholar） 179一、概述 179二、检索方法 180三、检索结果 181第四节 科学搜索引擎（Scirus） 181一、概述 181二、检索方法 182三、检索结果及处理 184第五节 维基百科全书 185一、概述 185二、检索方法 186三、检索结果 186 第八章 化学结构的可视化 187 第一节 化学结构的表示和可视化 187一、化学结构的表示 187二、二维化学结构的表示和可视化 188三、三维化学结构的表示和可视化 189四、大分子化学结构的表示和可视化 191五、分子表面的显示 192六、化学结构的网络表示 193第二节 ISIS/Draw 的使用 197一、简介 197二、操作界面 197三、分子结构图的绘制 199四、电子转移和原子特征的表示 200五、化学反应式的绘制 201六、其他功能 201第三节 ChemDraw

第一图书网, tushu007.com

的使用 202一、简介 202二、操作界面 203三、二维分子结构的绘制 206四、其他功能 210 第九章 三维分子模型设计 213 第一节 分子力学和分子建模 213一、分子力学基本原理 213二、分子力场参数化 216三、三维分子模型的构建 217第二节 DS ViewerPro 的使用 218一、简介 218二、操作界面 219三、分子模型的绘制 221四、分子模型的显示 222五、其他功能 226第三节 Chem3D的使用 227一、简介 227二、操作界面 228三、分子模型的操作 231四、分子模型的构建 233五、分子结构数据的测定 236六、分子的计算 236七、分子表面和分子轨道图形的显示 237第四节 HyperChem的使用 238一、简介 238二、工具栏的使用 239三、菜单命令 240四、使用实例 259第五节 GaussView的使用 261一、简介 261二、操作界面 262三、分子模型的操作 265四、分子模型的构建 267五、分子结构数据的测定 270六、分子的计算 271七、计算结果的显示 271 参考文献 274

第一图书网, tushu007.com

编辑推荐

《化学信息学(第2版)》内容新颖，实用性强，适用面广，可作为高等院校有关专业本科生、研究生的教材，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。

第一图书网, tushu007.com

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