

1. Record Nr.	UNINA990001753250403321
Autore	Convegno peschicolo : <19. ; : 1988
Titolo	Atti : XIX convegno peschicolo, Faenza, 3 settembre 1988 / Camera di Commercio Industria Artigianato e Agricoltura di Ravenna
Pubbl/distr/stampa	Ravenna-Forli : Camera di Commercio Industria Artigianato e Agricoltura, 1990
Descrizione fisica	167 p. ; 24 cm
Disciplina	634.25
Locazione	FAGBC
Collocazione	60 634.25 COPE 1990
Lingua di pubblicazione	Italiano
Formato	Materiale a stampa
Livello bibliografico	Monografia
2. Record Nr.	UNINA9911006567103321
Titolo	Drug design strategies : computational techniques and applications // edited by Lee Banting, Timothy Clark
Pubbl/distr/stampa	Cambridge, : RSC Pub., 2012
ISBN	9781621981398 1621981398
Edizione	[1st ed.]
Descrizione fisica	1 online resource (251 p.)
Collana	RSC drug discovery series, , 2041-3203 ; ; 20
Altri autori (Persone)	BantingLee ClarkTimothy
Disciplina	615.19 615.1900113
Soggetti	Drugs - Design - Computer simulation
Lingua di pubblicazione	Inglese
Formato	Materiale a stampa
Livello bibliografico	Monografia
Note generali	Description based upon print version of record.
Nota di bibliografia	Includes bibliographical references and index.
Nota di contenuto	i-iv; v-vi; vii-x; 1-26; 27-55; 56-86; 87-106; 107-119; 120-163;

164-183; 184-209; 210-231; 232-240

Sommario/riassunto

This book documents the latest research into the theory and application of force-fields, semi-empirical molecular orbital, density functional and ab initio calculations, Quantum Mechanical (QM) based modelling, Atoms in Molecules (AIM) approach, and biomolecular dynamics. It also covers theory and application of 2D cheminformatics, QSAR/QSPR, ADME properties of drugs, drug docking/scoring protocols and approaches, topological methodology, and modelling accurate inhibition constants of enzymes. Finally, the book gives the theory and applications of multiscale modelling of proteins and biomolecu
