

1. Record Nr.	UNINA9910144132603321
Autore	Kubinyi Hugo
Titolo	QSAR : Hansch analysis and related approaches [[electronic resource] /] / by Hugo Kubinyi
Pubbl/distr/stampa	Weinheim ; ; New York, : VCH, c1993
ISBN	1-281-75888-4 9786611758882 3-527-61682-9 3-527-61683-7
Descrizione fisica	1 online resource (254 p.)
Collana	Methods and principles in medicinal chemistry ; ; v. 1
Disciplina	572.072 615 615.1901
Soggetti	QSAR (Biochemistry) Pharmaceutical chemistry Electronic books.
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 (p. [183]-210) and index.
Nota di contenuto	QSAR: Hansch Analysis and Related Approaches; Content; 1. Introduction; 1.1. History and Development of QSAR; 1.2. Drug-Receptor Interactions; 2. Biological Data. The Additivity of Group Contributions; 3. Parameters; 3.1. Lipophilicity Parameters; 3.2. The Measurement of Partition Coefficients and Related Lipophilicity Parameters; 3.3. Lipophilicity Contributions and the Calculation of Partition Coefficients; 3.4. Polarizability Parameters; 3.5. Electronic Parameters; 3.6. Steric Parameters; 3.7. Other Parameters; 3.8. Indicator Variables; 4. Quantitative Models 4.1. The Extrathermodynamic Approach (Hansch Analysis)4.2. The Additivity Model (Free Wilson Analysis); 4.3. The Relationships between Hansch and Free Wilson Analysis (The Mixed Approach); 4.4. Nonlinear Relationships; 4.5. Dissociation and Ionization of Acids and Bases; 4.6. Other QSAR Approaches; 5. Statistical Methods; 5.1. Regression Analysis; 5.2. The Significance and Validity of QSAR Regression Equations; 5.3. Partial Least Squares (PLS) Analysis and Other

Multivariate Statistical Methods; 6. Design of Test Series in QSAR; 7. Applications of Hansch Analysis; 7.1. Enzyme Inhibition
7.2. Other in vitro Data7.3. Pharmacokinetic Data; 7.4. Other Biological Data; 7.5. Activity-Activity Relationships; 8. Applications of Free Wilson Analysis and Related Models; 9. 3D QSAR Approaches; 9.1. Stereochemistry and Drug Action; 9.2. Active Site Interaction Models; 9.3. Comparative Molecular Field Analysis (CoMFA); 9.4. Molecular Similarity QSAR Analyses; 10. Summary and Conclusions; References; Index

Sommario/riassunto

Finding the new remedy for a certain disease: an inspired goal. QSAR, an invaluable tool in drug design, aids scientists to attain this aim. This book is a long-awaited comprehensive text to QSAR and related approaches. It provides a practice-oriented introduction to the theory, methods and analyses for QSAR relationships, including modelling-based and 3D approaches. Hugo Kubinyi is a leading expert in QSAR. Readers will benefit from the author's 20 years of practical experience, from his careful calculations and recalculations of thousands of QSAR equations. Among the topics cov

2. Record Nr. UNINA9910508446303321

Autore Gentile Guido

Titolo Introduzione ai sistemi dinamici - Volume 1 : Equazioni differenziali ordinarie, analisi qualitativa e alcune applicazioni / / by Guido Gentile

Pubbl/distr/stampa Milano : , : Springer Milan : , : Imprint : Springer, , 2021

ISBN 88-470-4012-4

Edizione [1st ed. 2021.]

Descrizione fisica 1 online resource (XVI, 656 pagg. 188 figg.)

Collana La Matematica per il 3+2, , 2038-5757 ; ; 132

Disciplina 530.15

Soggetti Mathematical physics

Dynamics

Mathematical analysis

Mathematical Physics

Dynamical Systems

Analysis

Sistemes dinàmics diferenciables

Equacions diferencials

Anàlisi matemàtica

Llibres electrònics

Lingua di pubblicazione	Italiano
Formato	Materiale a stampa
Livello bibliografico	Monografia
Nota di contenuto	1 Operatori lineari -- 2 Equazioni differenziali lineari -- 3 Equazioni differenziali ordinarie -- 4 Analisi qualitativa del moto -- 5 Esempi di analisi qualitativa -- 6 Sistemi unidimensionali -- 7 Moto in un campo centrale -- 8 Moti relativi -- 9 Vincoli e corpi rigidi -- 10 Proprietà dei corpi rigidi.
Sommario/riassunto	Il testo mira a fornire un'introduzione ai sistemi dinamici. Il lettore modello è uno studente di un corso di laurea triennale in matematica o fisica, o, più in generale, chiunque disponga delle nozioni che si acquisiscono nella prima metà di tali corsi di studio. In quest'ottica il testo unisce una trattazione matematica rigorosa a un linguaggio matematico accessibile anche a lettori meno esperti, richiamando risultati studiati in insegnamenti precedenti o fornendo gli strumenti necessari per colmare eventuali lacune. Sono comunque trattati estesamente argomenti avanzati che di consuetudine non sono discussi nell'ambito di un insegnamento del primo biennio; in particolare è dato largo spazio alla teoria dei sistemi dinamici in campi che esulano dai programmi tradizionali di meccanica analitica. In questo modo il testo può essere di interesse anche per uno studente di un corso di secondo livello o per un ricercatore con una preparazione di base più solida. I temi trattati sono: teoria fondamentale delle equazioni differenziali ordinarie; analisi qualitativa del moto, con particolare enfasi su sistemi planari e sistemi meccanici conservativi unidimensionali; problema dei due corpi e moti in un campo centrale; moti relativi e forze apparenti; proprietà cinematiche e dinamiche dei corpi rigidi. Il testo è corredata di vari esempi illustrativi nonché, alla fine di ogni capitolo, di un ampio numero di esercizi, in gran parte svolti, di carattere sia teorico che pratico, che consentono di approfondire i temi trattati e di comprendere meglio la teoria tramite applicazioni di interesse fisico ed esempi esplicativi.