

4

化学结构二维子结构检索的开发

刘冰,周家驹

中国科学院过程工程研究所, 北京 100080

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

摘要 将图形通用匹配VF算法应用到化学结构子结构检索中,用面向对象的方法,实现了化学结构数据库中二维子结构检索功能,程序各模块之间相互独立、可移植性强、健壮性好.通过与3DFS比较,结果正确,适于处理大型化学结构数据库,现已应用于中药数据库系统药物先导化合物的发现.

关键词 [二维子结构检索](#); [子结构匹配](#); [VF算法](#); [面向对象](#)

分类号 [O6-39](#)

DOI:

对应的英文版文章: [2034-017](#)

通讯作者:

作者个人主页: [刘冰](#); [周家驹](#)

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF](#) (142KB)

▶ [\[HTML全文\]](#) (0KB)

▶ [参考文献\[PDF\]](#)

▶ [参考文献](#)

服务与反馈

▶ [把本文推荐给朋友](#)

▶ [加入我的书架](#)

▶ [加入引用管理器](#)

▶ [引用本文](#)

▶ [Email Alert](#)

相关信息

▶ 本刊中 包含“[二维子结构检索; 子结构匹配; VF算法; 面向对象](#)”的 [相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

· [刘冰](#)

· [周家驹](#)