

当前位置: 科技频道首页 >> 现代农业 >> 土肥植保 >> 计算机辅助农药分子设计方法及软件开发



请输入查询关键词

科技频道

搜索

## 计算机辅助农药分子设计方法及软件开发

关键词: 农药 分子结构 计算机辅助设计 设计软件 设计

所属年份: 2004

成果类型: 应用技术

所处阶段:

成果体现形式:

知识产权形式:

项目合作方式:

成果完成单位: 中国科学院过程工程研究所

成果摘要:

该成果综合应用计算机技术、数学方法、计算机化学最新成就, 针对新农药创制的迫切需要进行研究, 以开发易于推广的通用分子设计工具为目标, 建立在二维、三维水平上的结构与活性关系及活性预测软件系统, 提出合成建议, 实现开发新药的合理循环, 达到在结构优化及结构产生两方面减少盲目性, 节约合成及生测费用, 提高效率, 加快新农药开发的目的。该成果包括两方面, 基础研究方面: 在国内外发表论文67篇, 已完成尚未发表13篇, 含五项创新性成果: (1) 提出和实现表达、处理分子结构信息的结构框架模型方法, 含基于自洽迭代的基团电负性新方法, 新疏水参数自动计算方法, 包括460种基团的物化参数库的研制; (2) 人工智能方法研究, 提出了合理的神经网络收敛判据, 克服了过拟合, 解决了既要自动提取重要结构因素, 又要表达非线性关系的难题; (3) 建立了农药结构与活性数据库, 含8769种农药化合物, 活性数据十万多个; (4) 三维定量构效关系研究, 建立了通用方法; (5) 实现了分子设计合理循环, 在发现新型高效除草剂先导化合物上初获成功, 技术研究方面, 建立了两个分子设计系统: 以CASAC为核心的微机上的结构优化工具系统; 工作站上的示范性工具系统资源、能源与环境化工处理镍基金电解泥的新工艺。

成果完成人:

[完整信息](#)

### 行业资讯

新疆洪水灾害及防洪减灾对策

抗旱防涝地膜

液氨直接施肥技术研究与应用

土壤改良保水增效剂开发生产

农作物抗旱、抗午间休眠剂(丰...

磁化复合肥生产技术开发

瑞得牌26%福.多.甲棉花种衣剂

瑞得牌17%多.克.醇小麦种衣剂

年产3万吨高效有机肥

10万吨氨基酸生物肥生产技术开发

### 成果交流

### 推荐成果

- [出口蔬菜\(有机食品\)栽培及病虫...](#) 04-23
- [华南有机食品生产核心技术系统研究](#) 04-23
- [植物生长调节剂](#) 04-23
- [连栋大棚蔬菜无土栽培营养调控技...](#) 04-23
- [冬作经济绿肥高产栽培技术与肥效研究](#) 04-23
- [设施栽培优质蔬菜主要病虫害预报...](#) 04-23
- [温室生菜速长营养液](#) 04-23

Google提供的广告

>> 信息发布