

论文

晶体结构微机解析系统——NOMCSDP程序包

伍伯牧;吕扬

中国科学院生物物理研究所,北京100101; **中国医学科学院药物研究所,北京100050

摘要:

晶体结构分析程序包——NOMCSDP(natural organic molecule crystal structuredetermination package)版本1.0是在广泛使用的IBM微机上开发的。它不但能够完成X射线晶体结构分析的全过程,而且还适用于中子衍射晶体结构计算。NOMCSDP有操作简便,晶体学专门知识干预少,解析能力强,功能齐全等优点。作者以天然产物分子结构测定为线索,论述了X射线晶体结构分析方法在测定分子结构中实现常规化的必然趋势,并举例说明了NOMCSDP的实际应用。我们期望这个版本在促进晶体结构分析常规化的进程中发挥积极作用。

关键词: 晶体结构分析 微机

SYSTEM OF CRYSTAL STRUCTURE ANALYSIS ON PCCOMPUTER——NOMCSDP PACKAGE

BM Wu;Y Lu

Abstract:

The package of crystal structure analysis---NOMCSDP (NaturalOrganic Molecule Crystal Structure Determination Package)Version 1.0 has been devel-oped on the widely used IBM PC computer. It can perform the whole task of X-raycrystal structure analysis, as well as can be used for computing crystal structure onneutron diffraction. NOMCSDP has many advantages--easy operation, less needs forspecialized crystallographic knowledge, wide applicability of solving structure, and havingall the necessary functions. The inexorable trend of X-ray crystal structure analysis in thecourse of realizing the wide spread use in determining molecular structure of natural productswas discussed and the pratical uses of NOMCSDP were illustrated with examples. We hopethat this version will play active role in the process of promoting routine use of crystalstructure analysis.

Keywords: Microcomputer Crystal structure analysis

收稿日期 1991-05-31 修回日期 网络版发布日期

DOI:

基金项目:

通讯作者:

作者简介:

参考文献:

本刊中的类似文章

文章评论 (请注意:本站实行文责自负, 请不要发表与学术无关的内容!评论内容不代表本站观点.)

扩展功能

本文信息

- Supporting info
- PDF (280KB)
- [HTML全文]
- 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
- 文章反馈
- 浏览反馈信息

本文关键词相关文章

- 晶体结构分析
- 微机

本文作者相关文章

- 伍伯牧
- 吕扬

PubMed

- Article by
- Article by

反 馈 人	<input type="text"/>	邮箱地址	<input type="text"/>
反			

反馈
标题

验证码

3893