

## 新技术可高效模拟聚电解质系统

文章来源: 科技日报 房琳琳 曹霞 发布时间: 2015-04-07 【字号: 小 中 大】

我要分享

最近在美国科罗拉多州丹佛市举办的第249届美国化学学会（ACS）会议上，北卡罗莱纳州立大学发布的新型计算机模拟技术——隐性溶剂离子强度法（ISIS）获得计算化学分项研究优秀奖，理由是“向用计算机高效准确模拟各种聚电解质系统的广泛应用前景迈出重要一步”。

该成果由北卡罗莱纳州立大学博士研究生李楠和分子模拟科学家亚奥斯拉瓦·英灵教授主持完成，研究结果作为封面文章曾发表在2015年1月《大分子理论与模拟》杂志上，并被物理学家组织网等多家网站报道。

李楠说，新型模拟技术主要是用单一参数自动模拟系统中的离子效应，使得计算机模拟效率“提高到前所未有的程度”。通常，模拟一个复杂聚电解质的水溶液系统需要耗费大量的时间和资源，主要工作在于追踪每个分子或离子与每个聚电解质单体的相互作用，但系统通常包含大量的分子、离子和聚合物单体。因此，“对复杂聚电解质系统的计算机模拟有一定难度，用一般的原子级别和粗粒化模拟方法，模拟的效率和准确性都不太理想”。

聚电解质有着广泛的工业用途，例如增稠剂、分散剂、乳化剂等，使用这种新型技术可以用来模拟大尺度的聚电解质系统，快速鉴别出潜在的聚电解质系统候选物。李楠说：“这种方法可以更快完成复杂聚电解质系统的计算机模拟研究，从而有助于科研人员设计新型聚电解质材料。”

值得关注的是，除了大大加快新型聚电解质材料的研发进程，该技术还有助于天然聚电解质的研究。人体中与生命健康息息相关的生物大分子DNA、RNA及多种蛋白质、多肽均为聚电解质，因此该技术将在遗传疾病诊断、基因修复探索、癌症药物大规模筛选和研发，以及生命结构揭秘等生命与医学领域发挥重大作用。

（责任编辑：侯茜）

附件：

### 热点新闻

#### 中科院传达2015年夏季党组扩大...

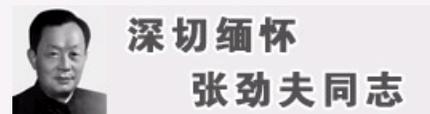
- 中科院“率先行动”计划组织实施方案
- 中科院组织开展低阶煤、纳米先导专项中...
- 中科院党组中心组召开“三严三实”专题...
- 白春礼在青岛调研工作
- 国家蛋白质科学研究（上海）设施通过国...

### 视频推荐



【新疆新闻联播】第八届中国科学院-新疆科技合作洽谈会开幕

### 专题推荐



### 相关新闻

