

DMF水溶液的分子动力学模拟

朱龙华,王兰州,李浩然,雷毅,潘海华,韩世钧

中国计量学院生命科学院,杭州(310094);浙江大学化学系,杭州(310027)

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

摘要 采用Optimized Potentials for Liquid Simulations-All Atom(OPLSAA)模型 对298.15K N,N-二甲基甲酰胺(DMF)的水溶液进行了分子动力学模拟, 确定了溶液 的径向分布函数,

统计了不同浓度的DMF水溶液中各形态氢的比例分数, 并对该温 度下的1HMIR数据进行了预测,

结果与实验值吻合较好. 模拟结果表明: 选用的 OPLSAA从模型是可靠的,

它能反映DMF水溶液体系本质的势能.

关键词 [二甲基甲酰胺](#) [动力学研究](#) [势能](#) [蛋白质](#)

分类号 [Q5](#)

Molecular Dynamics Simulation for DMF Aqueous Solution

Zhu Longhua,Wang Lanzhou,Li Haoran,Lei Yi

College of Life Sciences, China Institute of Metrology, Hangzhou (310034); Department of Chemistry, Zhejiang University, Hangzhou(310027)

Abstract

Key words [DMF](#) [KINETIC STUDY](#) [POTENTIAL ENERGY](#) [PROTEIN](#)

DOI:

通讯作者

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF\(0KB\)](#)

▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)

▶ [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](#)

▶ [复制索引](#)

▶ [Email Alert](#)

▶ [文章反馈](#)

▶ [浏览反馈信息](#)

相关信息

▶ [本刊中 包含“二甲基甲酰胺” 的相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

- [朱龙华](#)
- [王兰州](#)
- [李浩然](#)
- [雷毅](#)
- [潘海华](#)
- [韩世钧](#)