

研究论文

N-(1-萘基)琥珀酰亚胺分子间相互作用的计算机模拟

袁伟; 李贺先; 王颖; 杨海龙; 王国昌

南开大学高分子化学研究所, 功能高分子材料教育部重点实验室, 天津 300071

摘要:

对分子间相互作用比较复杂的N-(1-萘基)琥珀酰亚胺进行理论计算时, 提出了将溶液构建和随机构象搜索相结合的多分子相互作用体系构建方法, 可以简单而准确地得到二聚体和三聚体结构, 其中二聚体结构和采用分子对接方法得到的结果完全一致. 经密度泛函理论计算, 得到了在真空条件下二聚体结构的最低能量构象. 对较大体系的三聚体结构采用高精度分子力学进行了理论计算. 通过分子间相互作用对分子构象的影响讨论了溶液结晶过程中N-(1-萘基)琥珀酰亚胺分子构象变化, 为该化合物结晶机理的深入研究提供重要依据.

关键词: 分子间相互作用 N-(1-萘基)-琥珀酰亚胺 超分子体系 分子对接

收稿日期 2006-10-23 修回日期 2006-12-19 网络版发布日期 2007-04-11

通讯作者: 王国昌 Email: gcwang@nankai.edu.cn

本刊中的类似文章

扩展功能

本文信息

PDF(963KB)

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

▶ 分子间相互作用

▶ N-(1-萘基)-琥珀酰亚胺

▶ 超分子体系

▶ 分子对接

本文作者相关文章

▶ 袁伟

▶ 李贺先

▶ 王颖

▶ 杨海龙

▶ 王国昌