

胰岛素单体、双体分子静电势的计算

邵俊,温元凯,李振民

上海科技大学化学系;中国科学技术大学化学系;上海铁路局电子计算所

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

摘要 计算了三方二锌胰岛素晶胞不对称单位中两个胰岛素分子单体及其双体的分子静电势。结果表明:胰岛素两个单体分子的构象不同,其分子表面静电势也不相同,由于它们的构象是类似的,所以其电势分布也是接近的,单体胰岛素分子的表面静电势呈偶极型分布,双体的表面静电势基本保持单体的特征。文中还比较了两个单体分子及其集聚后的静电势变化。

关键词 [晶体结构测定](#) [单体](#) [计算](#) [晶胞](#) [量子化学](#) [胰岛素](#) [三维结构](#) [分子静电势](#)

分类号 [0641](#)

The molecular electrostatic potential of the insulin

SHAO JUN,WEN YUANKAI,LI ZHENMIN

Abstract

Key words [CRYSTAL STRUCTURE DETERMINATION](#) [MONOMER](#) [CALCULATION](#) [UNIT CELL](#) [QUANTUM CHEMISTRY](#) [INSULIN](#) [THREE DIMENSIONAL STRUCTURE](#) [MOLECULAR ELECTROSTATIC POTENTIAL](#)

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“晶体结构测定”的相关文章](#)
- ▶ [本文作者相关文章](#)

- [邵俊](#)
- [温元凯](#)
- [李振民](#)