

全原子分子动力学模拟结合核磁共振波谱研究N-甘氨酸水溶液的结构和弱相互作用

All-atom Molecular Dynamics Simulations and NMR Spectroscopy Study on Interactions and Structures in N-Glycylglycine Aqueous Solution

摘要点击 141 全文点击 79 投稿时间: 2011-6-19 采用时间: 2011-8-5

[查看全文](#) [查看/发表评论](#) [下载PDF阅读器](#)

doi: 10.1088/1674-0068/24/06/691-696

中文关键词 [全原子模拟](#) [核磁共振波谱](#) [甘氨酸水溶液](#) [氢键](#)

英文关键词 [All-atom simulation](#) [Temperature-dependent NMR](#) [N-glycylglycine aqueous solution](#) [Hydrogen bond](#)

基金项目

作者	单位	E-mail
张荣*	广东药学院药科学院, 物理化学教研室, 广州510006	zhangr@china.com.cn
吴文娟	广东药学院药科学院, 物理化学教研室, 广州510006	
黄景满	广东药学院药科学院, 物理化学教研室, 广州510006	
孟欣	广东药学院药科学院, 物理化学教研室, 广州510006	

中文摘要

采用分子动力学模拟方法结合核磁共振化学位移系统研究了甘氨酸水溶液体系饱和和溶解度范围的弱相互作用. 径向分布函数表明体系中不同类型的原子显示出形成氢键的不同能力. 氢键网络分析发现了不同氢键所能形成的分子簇结构. 随温度变化核磁共振化学位移值用于研究形成氢键的变化情况, 并和模拟得到的结果进行比较, 模拟和实验结果得到了较好的吻合.

英文摘要

All-atom molecular dynamics (MD) simulation and the NMR spectra are used to investigate the interactions in N-glycylglycine aqueous solution. Different types of atoms exhibit different capability in forming hydrogen bonds by the radial distribution function analysis. Some typical dominant aggregates are found in different types of hydrogen bonds by the statistical hydrogen-bonding network. Moreover, temperature-dependent NMR are used to compare with the results of the MD simulations. The chemical shifts of the three hydrogen atoms all decrease with the temperature increasing which reveals that the hydrogen bonds are dominant in the glycylglycine aqueous solution. And the NMR results show agreement with the MD simulations. All-atom MD simulations and NMR spectra are successful in revealing the structures and interactions in the N-glycylglycine-water mixtures.

Copyright©2007 IOPP

承办: 中国科学技术大学 协办: 中国科学院大连化学物理研究所
主管: 中国科学技术协会 主办: 中国物理学会 国际代理发行: 英国物理学会

编辑部地址: 安徽省合肥市金寨路96号 中国科学技术大学东区外语楼二楼
联系电话: 0551-3601122 Email: cjcp@ustc.edu.cn

本系统由北京勤云科技发展有限公司设计