

纤维素二级结构的分子动力学模拟

Secondary Structure Analysis of Native Cellulose by Molecular Dynamics Simulations with Coarse-Grained Model

摘要点击 36 全文点击 11 投稿时间: 2011-12-27 采用时间: 2012-2-12

[查看全文](#) [查看/发表评论](#) [下载PDF阅读器](#)

doi: 10.1088/1674-0068/25/02/191-198

中文关键词 [\$\beta\$ -纤维素](#) [粗粒度模型](#) [二级结构](#) [分子动力学](#)

英文关键词 [I \$\beta\$ cellulose](#) [Coarse-grained model](#) [Secondary structure](#) [Molecular dynamics](#)

基金项目

作者	单位	E-mail
吴帅	南昌大学高等研究院, 南昌330031	
占海艺	南昌工程学院, 南昌330031	
王红明*	南昌大学高等研究院, 南昌330031	hongmingwang@ncu.edu.cn
居燕*	南昌大学高等研究院, 南昌330031	juyang@ncu.edu.cn

中文摘要

运用分子动力学模拟的方法, 详细研究了 β -纤维素的二级结构. 随着糖链数量的增加, 纤维素也变成螺旋型结构. 当糖链数量为6、24和36时, 纤维素的结构为右手螺旋. 但是, 当糖链数量为8、12、16、时, 纤维素的结构为左手螺旋. 计算还表明, 当糖链数量为36时, 结构最稳定.

英文摘要

The secondary structure of different I β cellulose was analyzed by a molecular dynamics simulation with MARTINI coarse-grained force field, where each chain of the cellulose includes 40 D-glucoses units. Calculation gives a satisfied description about the secondary structure of the cellulose. As the chain number increasing, the cellulose becomes the form of a helix, with the diameter of screw growing and spiral rising. Interestingly, the celluloses with chain number N of 4, 6, 24 and 36 do show right-hand twisting. On the contrast, the celluloses with N of 8, 12, 16 chains are left-hand twisting. These simulations indicate that the cellulose with chain number larger than 36 will break down to two parts. Besides, the result indicates that 36-chains cellulose model is the most stable among all models. Furthermore, the Lennard-Jones potential determines the secondary structure. In addition, an equation was set up to analyze the twisting structure.

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