

研究简报

分子电子结构的造型系统

吴静^①, 朱敏慧^①, 叶学其^②

^①中国科学院电子学研究所 北京 100080; ^②中国科学技术大学研究生院 北京 100039

收稿日期 1991-7-8 修回日期 1992-1-24 网络版发布日期 2009-9-12 接受日期

摘要

本文叙述了一个实用的分子电子结构的造型系统, 用来辅助研究分子内部的微观状态(如电子波函数、电荷密度、静电势和空间的分布等)。该造型系统将在VAX-11/780上得到的分子轨道计算结果在微机仿真图形工作站用三维网格图和云雾状点图表示出来。它为研究分子内部电子结构以及新材料的设计提供了有效的辅助工具。本文以抗肿瘤药物分子为研究对象, 取得了初步结果。

关键词 [计算机应用](#) [三维立体造型](#) [分子图形](#) [药物设计](#)

分类号

A MODELLING SYSTEM FOR ELECTRONIC STRUCTURES OF MOLECULES

Wu Jing^①, Zhu Minhui^①, Ye Xueqi^②

^①Institute of Electronics Academia Sinica Beijing 100080; ^②Graduate School USTC Beijing 100039

Abstract

A practical electronic structural modelling system is presented. This system can be used to study the distribution of intermolecular microscopic properties, such as electron densities and intermolecular potentials. It includes calculation and representation of molecular properties. Display of map is represented as isometric 3D mesh surface and fuzzy cloud dot map. This system has been used to study the anti-tumor drug, and some results are obtained.

Key words [Computer application](#) [3D modelling system](#) [Molecular graphics](#) [Drugdesign](#)

DOI :

通讯作者

作者个人主页 吴静^①; 朱敏慧^①; 叶学其^②

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF\(739KB\)](#)

▶ [\[HTML全文\]\(OKB\)](#)

▶ [参考文献\[PDF\]](#)

▶ [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“计算机应用”的 相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

· [吴静](#)

· [朱敏慧](#)

· [叶学其](#)