

化学键的本质
与生化反应动力学模拟

分子间相互作用与化学键

蛋白质分子结构与活性位点

分子间相互作用与化学键

从力场到化学键

量子力学简介

能量量子化

Schrödinger 方程与量子力学的建立

量子力学与化学键的本质

分子轨道理论

分子的稳定性与键级

化学键的本质

生物化学反应机理的模拟与常用软件

QM/MM 与酶化学反应机理

QM/MM 计算软件

化学键的本质与生化反应动力学模拟

北京市计算中心 智能计算事业部

2023.06

Outline

化学键的本质
与生化反应动力学模拟

分子间相互作用与化学键

蛋白质分子结构与活性位点

分子间相互作用与化学键

从力场到化学键

量子力学简介

能量量子化

Schrödinger 方程与量子力学的建立

量子力学与化学键的本质

分子轨道理论

分子的稳定性与键级

化学键的本质

生物化学反应机理的模拟与常用软件

QM/MM 与酶化

学反应机理

QM/MM 计算软

1 分子间相互作用与化学键

- 蛋白质分子结构与活性位点
- 分子间相互作用与化学键
- 从力场到化学键

2 量子力学简介

- 能量量子化
- Schrödinger 方程与量子力学的建立

3 量子力学与化学键的本质

- 分子轨道理论
- 分子的稳定性与键级
- 化学键的本质

4 生物化学反应机理的模拟与常用软件

- QM/MM 与酶化学反应机理
- QM/MM 计算软件

遗传学、分子生物学与生物化学

化学键的本质
与生化反应动力学模拟

分子间相互作用与化学键

蛋白质分子结构与活性位点

分子间相互作用与化学键

从力场到化学键

量子力学简介

能量量子化

Schrödinger 方程与量子力学的建立

量子力学与化学键的本质

分子轨道理论

分子的稳定性与键级

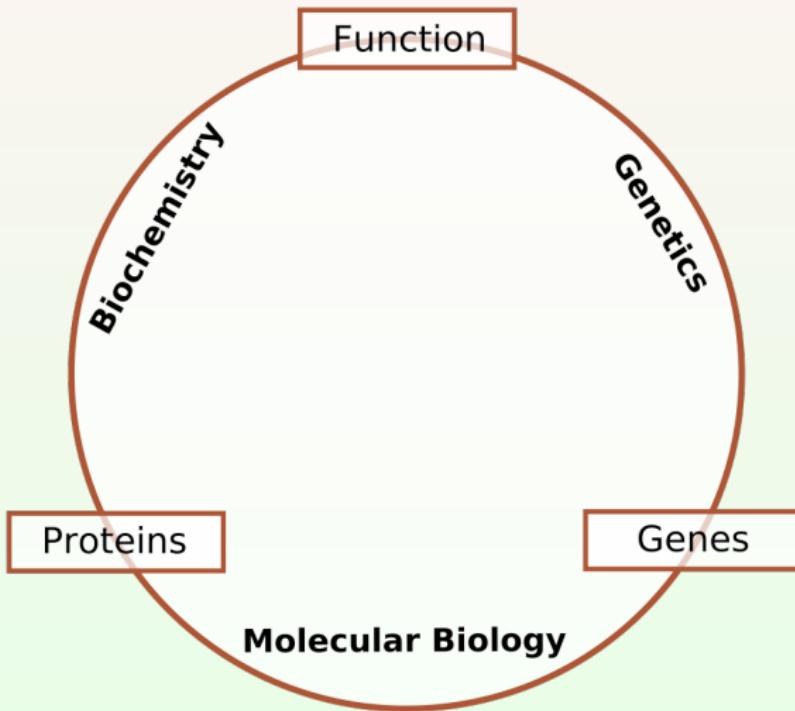
化学键的本质

生物化学反应机理的模拟与常用软件

QM/MM 与酶化

学反应机理

QM/MM 计算软



生物化学反应的特点

化学键的本质
与生化反应动力学模拟

分子间相互作用与化学键

蛋白质分子结构与活性位点

分子间相互作用与化学键

从力场到化学键

量子力学简介

能量量子化

Schrödinger 方程与量子力学的建立

量子力学与化学键的本质

分子轨道理论

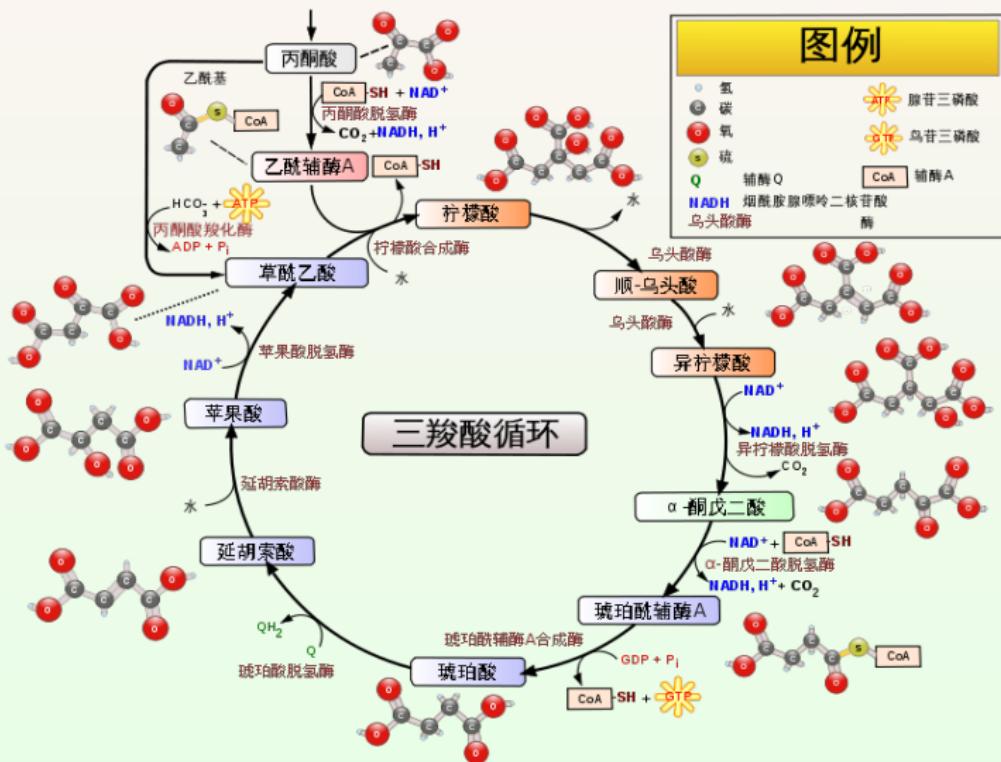
分子的稳定性与键级

化学键的本质

生物化学反应机理的模拟与常用软件

QM/MM 与酶化
学反应机理

QM/MM 计算软
件



生物化学反应机理研究

化学键的本质
与生化反应动力学模拟

分子间相互作用与化学键

蛋白质分子结构与活性位点

分子间相互作用与化学键

从力场到化学键

量子力学简介

能量量子化

Schrödinger 方程与量子力学的建立

量子力学与化学键的本质

分子轨道理论

分子的稳定性与键级

化学键的本质

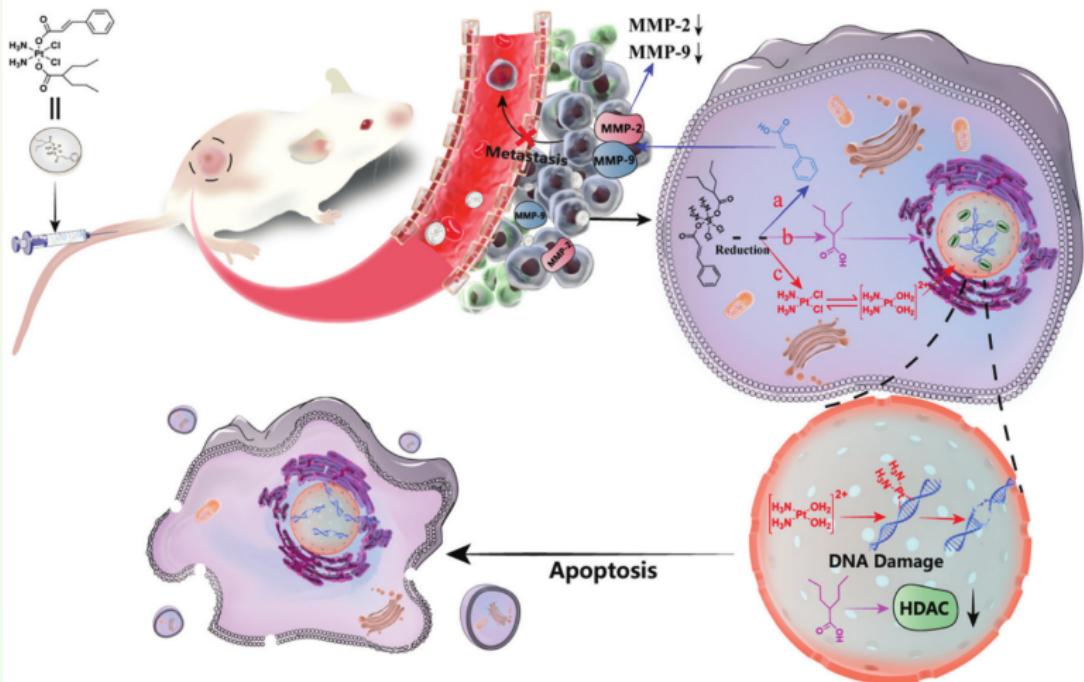
生物化学反应机理的模拟与常用软件

QM/MM 与酶化

学反应机理

QM/MM 计算软

件



分子间相互作用与化学键

化学键的本质
与生化反应动力学模拟

分子间相互作用与化学键

蛋白质分子结构与活性位点

分子间相互作用与化学键

从力场到化学键

量子力学简介

能量量子化

Schrödinger 方程与量子力学的建立

量子力学与化学键的本质

分子轨道理论

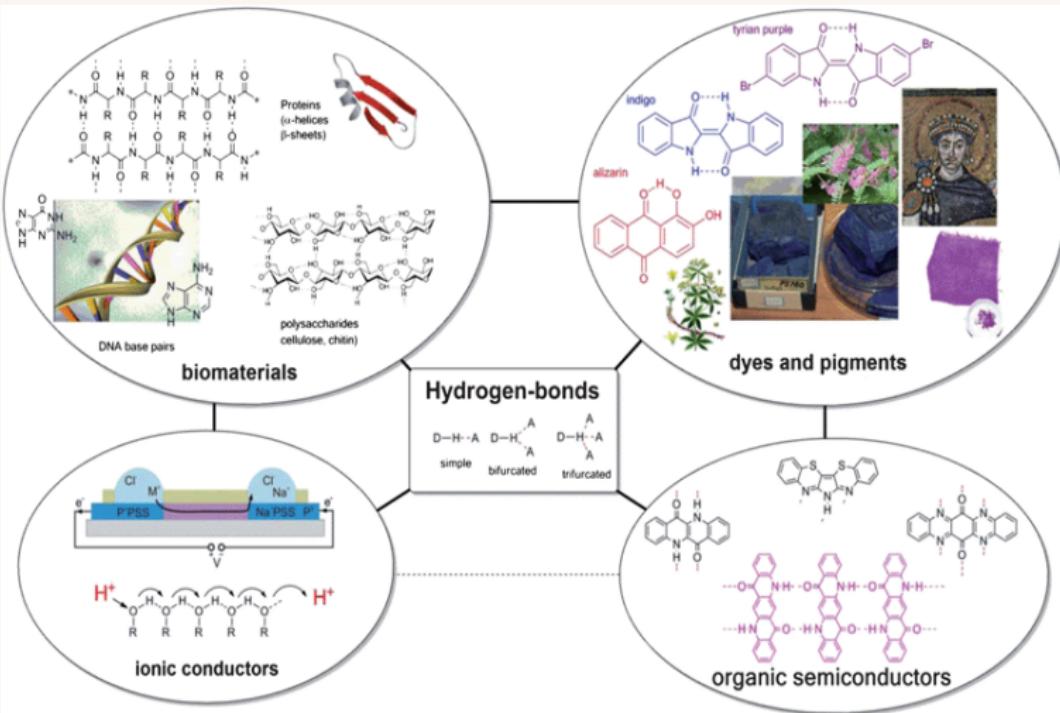
分子的稳定性与键级

化学键的本质

生物化学反应机理的模拟与常用软件

QM/MM 与酶化学反应机理

QM/MM 计算软件



蛋白质的结构与分子间作用力

化学键的本质
与生化反应动力学模拟

分子间相互作用
与化学键

蛋白质分子结构与活
性位点

分子间相互作用与化
学键

从力场到化学键

量子力学简介

能量量子化

Schrödinger 方
程与量子力学的建立

量子力学与化
学键的本质

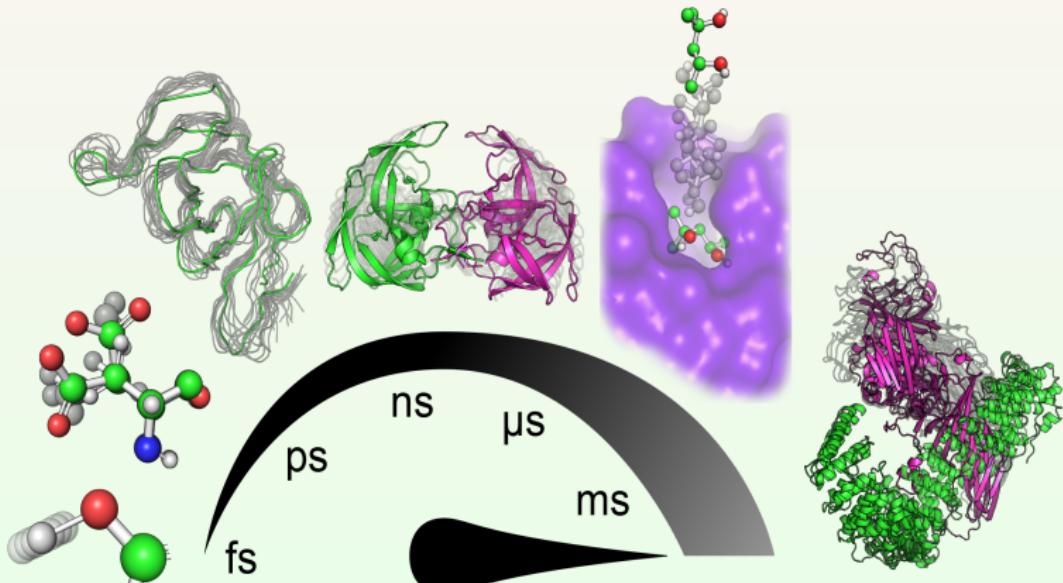
分子轨道理论

分子的稳定性与键级
化学键的本质

生物化学反应
机理的模拟与
常用软件

QM/MM 与酶化
学反应机理

QM/MM 计算软
件



H 键与蛋白质分子的折叠

化学键的本质
与生化反应动力学模拟

分子间相互作用与化学键

蛋白质分子结构与活性位点

分子间相互作用与化学键
从力场到化学键

量子力学简介

能量量子化

Schrödinger 方程与量子力学的建立

量子力学与化学键的本质

分子轨道理论

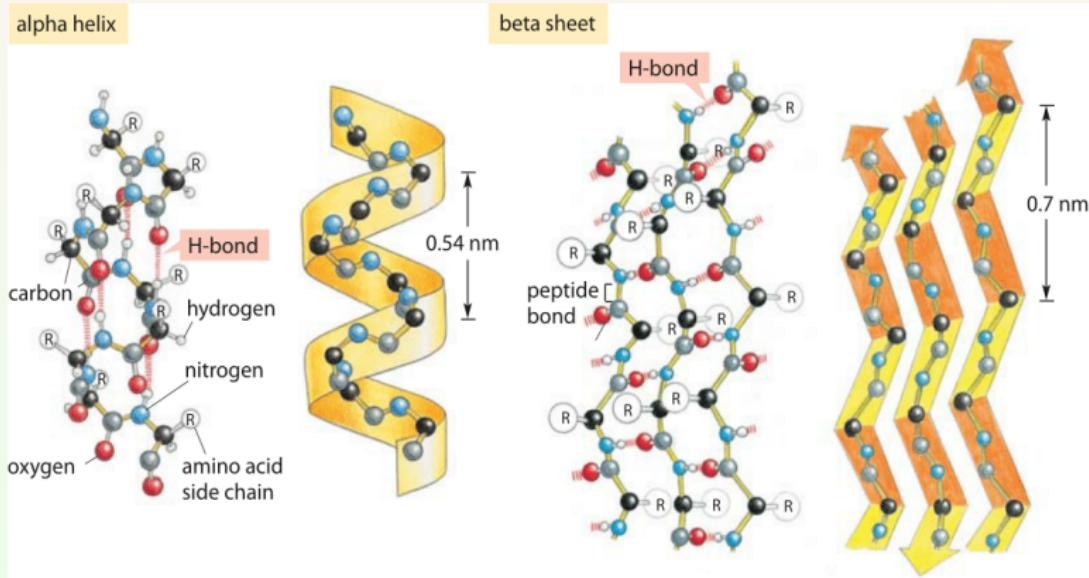
分子的稳定性与键级

化学键的本质

生物化学反应机理的模拟与常用软件

QM/MM 与酶化
学反应机理

QM/MM 计算软
件



分子动力学模拟: 蛋白质分子的折叠

化学键的本质
与生化反应动
力学模拟

分子间相互作
用与化学键
蛋白质分子结构与活
性位点

分子间相互作用与化
学键
从力场到化学键

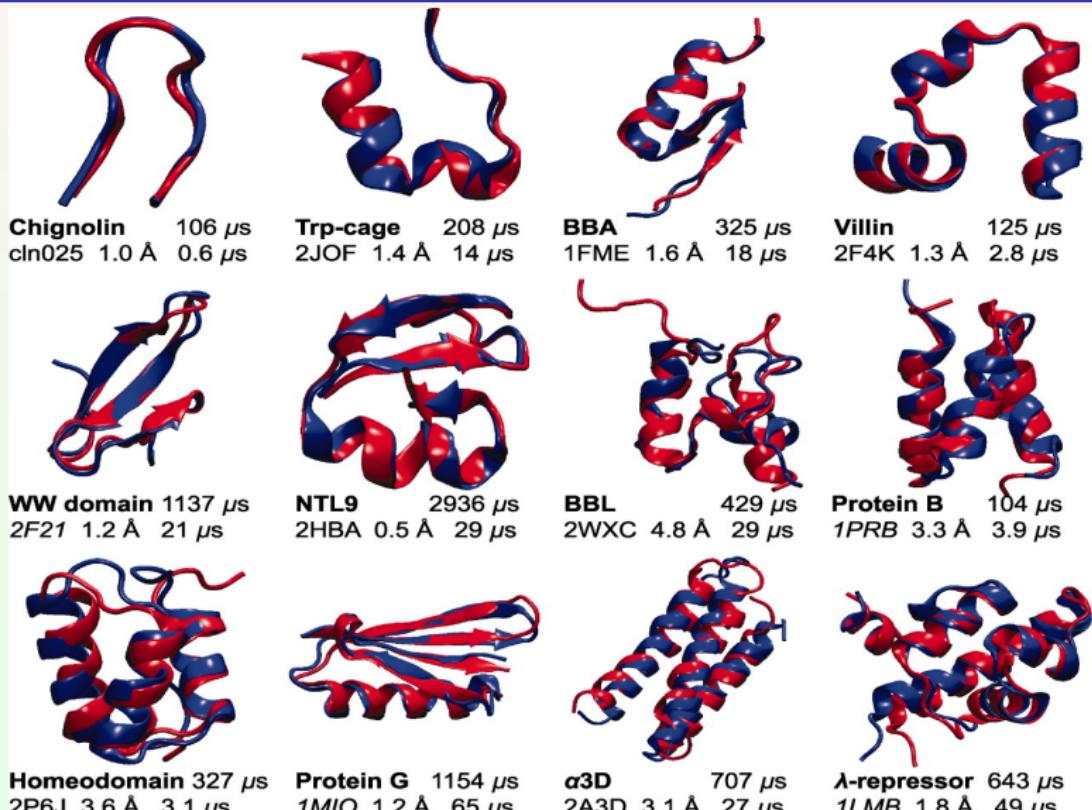
量子力学简介
能量量子化
Schrödinger 方
程与量子力学的建立

量子力学与化
学键的本质

分子轨道理论
分子的稳定性与键级
化学键的本质

生物化学反应
机理的模拟与
常用软件

QM/MM 与酶化
学反应机理
QM/MM 计算软
件



反应动力学: 酶与底物相互作用

化学键的本质
与生化反应动
力学模拟

分子间相互作
用与化学键

蛋白质分子结构与活
性位点

分子间相互作用与化
学键

从力场到化学键

量子力学简介

能量量子化

Schrödinger 方
程与量子力学的建立

量子力学与化
学键的本质

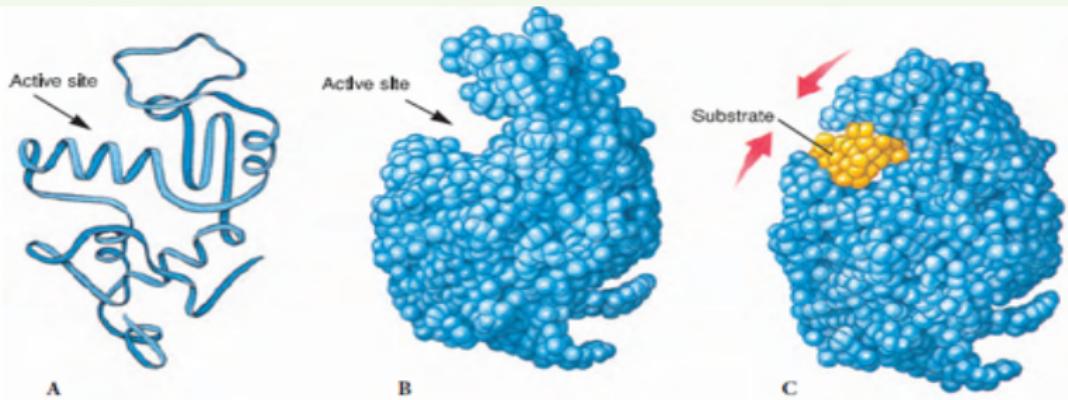
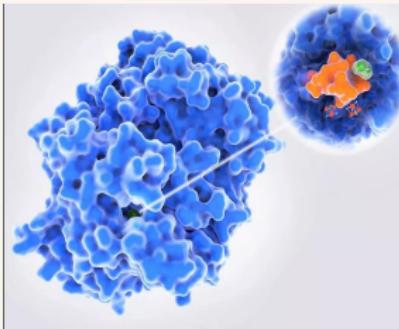
分子轨道理论

分子的稳定性与键级
化学键的本质

生物化学反应
机理的模拟与
常用软件

QM/MM 与酶化
学反应机理

QM/MM 计算软
件



微观相互作用的强度与分类

化学键的本质
与生化反应动力学模拟

分子间相互作用与化学键
蛋白质分子结构与活性位点
分子间相互作用与化学键
从力场到化学键

量子力学简介
能量量子化
Schrödinger 方程与量子力学的建立
量子力学与化学键的本质
分子轨道理论
分子的稳定性与键级
化学键的本质

生物化学反应机理的模拟与常用软件
QM/MM 与酶化学反应机理
QM/MM 计算软件

Relative Magnitudes of Forces

The types of bonding forces vary in their strength as measured by average bond energy.

Strongest



Covalent bonds (400 kcal)

Hydrogen bonding (12-16 kcal)

Dipole-dipole interactions (2-0.5 kcal)

Weakest

London forces (less than 1 kcal)

分子间相互作用的本质

化学键的本质
与生化反应动力学模拟

分子间相互作用与化学键

蛋白质分子结构与活性位点

分子间相互作用与化学键

从力场到化学键

量子力学简介

能量量子化

Schrödinger 方程与量子力学的建立

量子力学与化学键的本质

分子轨道理论

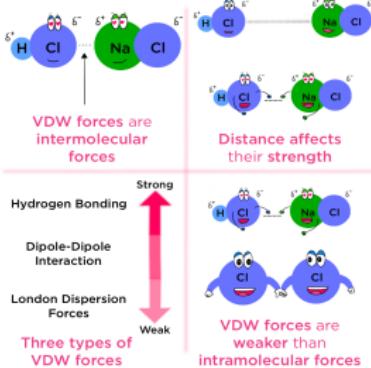
分子的稳定性与键级
化学键的本质

生物化学反应机理的模拟与常用软件

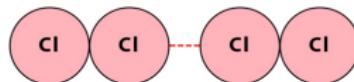
QM/MM 与酶化
学反应机理

QM/MM 计算软
件

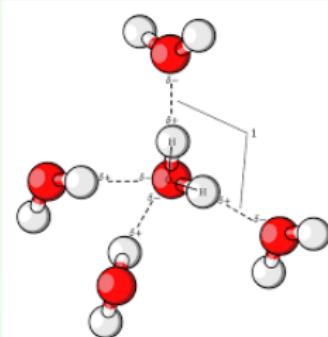
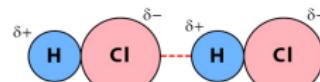
What are Van Der Waals (VDW) Forces



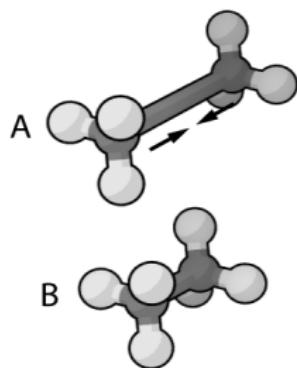
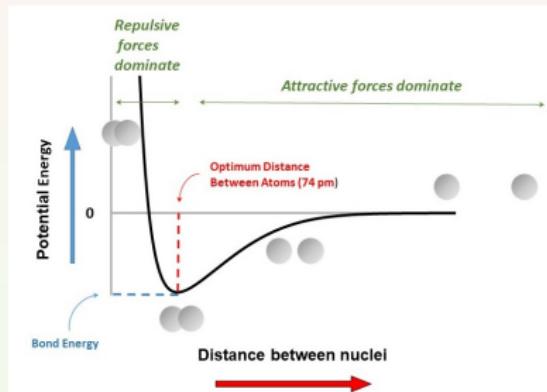
1. London dispersion forces : Chlorine (Cl_2)



2. Dipole-dipole interactions : Hydrogen chloride (HCl)



原子间相互作用的经典描述：力场



化学键的本质
与生化反应动
力学模拟

分子间相互作
用与化学键

蛋白质分子结构与活
性位点

分子间相互作用与化
学键

从力场到化学键

量子力学简介

能量量子化

Schrödinger 方
程与量子力学的建立

量子力学与化
学键的本质

分子轨道理论

分子的稳定性与键级

化学键的本质

生物化学反应
机理的模拟与
常用软件

QM/MM 与酶化
学反应机理

QM/MM 计算软
件

原子：原子核与电荷密度

化学键的本质
与生化反应动
力学模拟

分子间相互作
用与化学键

蛋白质分子结构与活
性位点

分子间相互作用与化
学键

从力场到化学键

量子力学简介

能量量子化

Schrödinger 方
程与量子力学的建立

量子力学与化
学键的本质

分子轨道理论

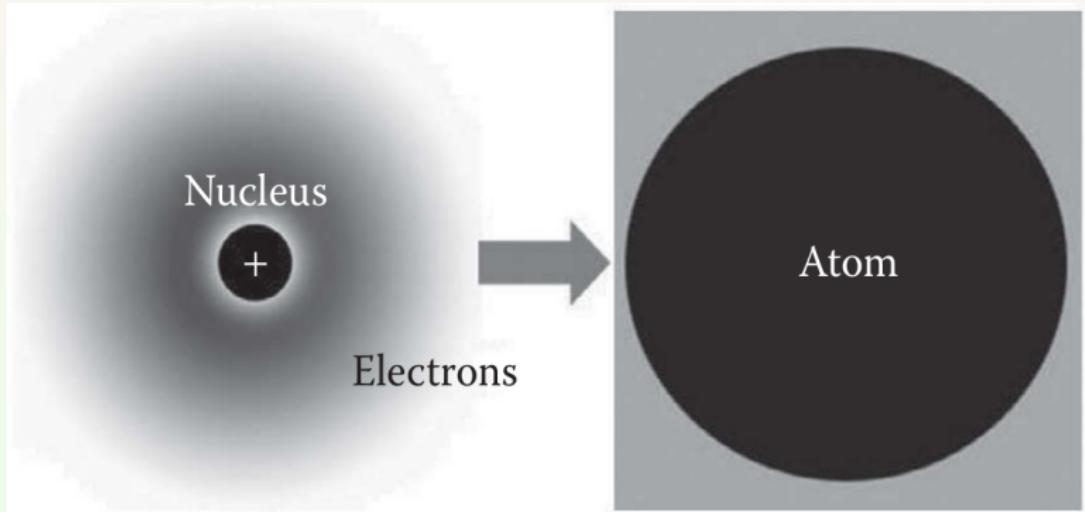
分子的稳定性与键级

化学键的本质

生物化学反应
机理的模拟与
常用软件

QM/MM 与酶化
学反应机理

QM/MM 计算软
件



原子间相互作用：原子核/离子实与电荷密度

化学键的本质
与生化反应动力学模拟

分子间相互作用与化学键

蛋白质分子结构与活性位点

分子间相互作用与化学键

从力场到化学键

量子力学简介

能量量子化

Schrödinger 方程与量子力学的建立

量子力学与化学键的本质

分子轨道理论

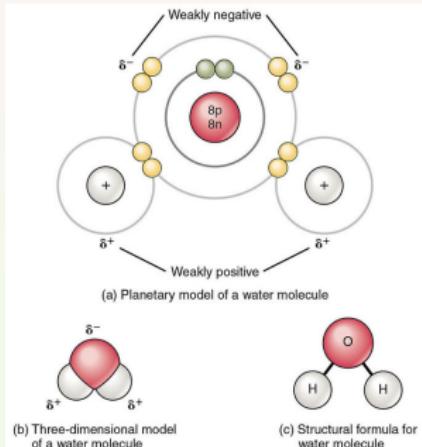
分子的稳定性与键级

化学键的本质

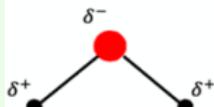
生物化学反应机理的模拟与常用软件

QM/MM 与酶化
学反应机理

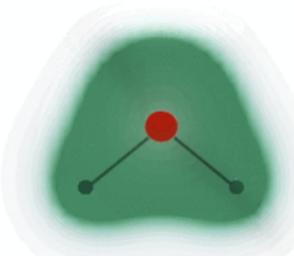
QM/MM 计算软
件



Point-Charge Models



HIPPO



电荷密度与力场

化学键的本质
与生化反应动力学模拟

分子间相互作用
与化学键

蛋白质分子结构与活性位点

分子间相互作用与化学键

从力场到化学键

量子力学简介

能量量子化

Schrödinger 方程与量子力学的建立

量子力学与化学键的本质

分子轨道理论

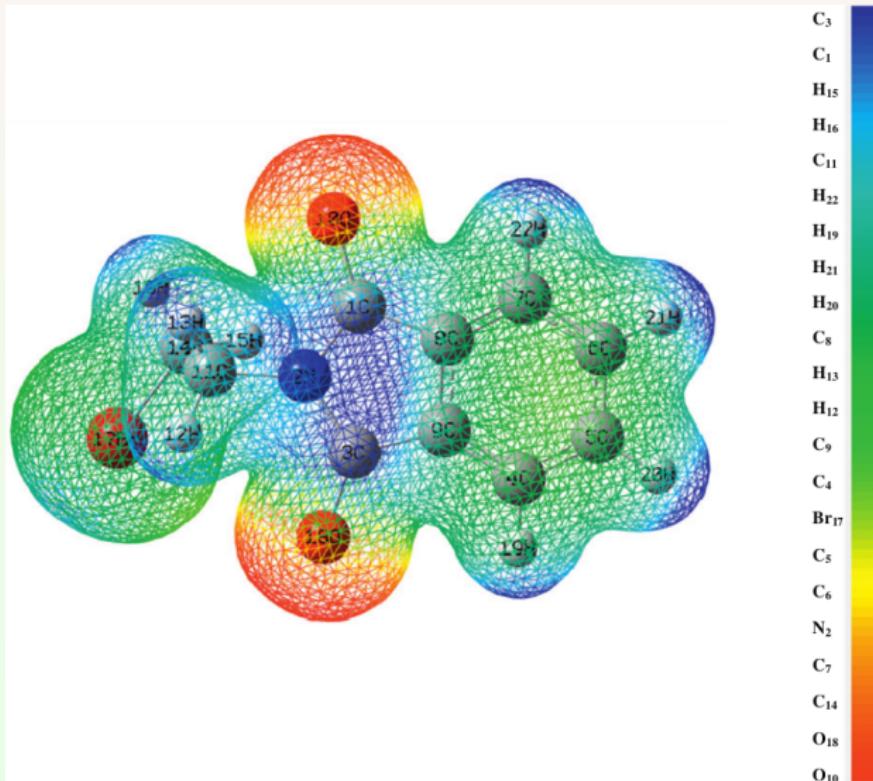
分子的稳定性与键级

化学键的本质

生物化学反应机理的模拟与常用软件

QM/MM 与酶化
学反应机理

QM/MM 计算软
件



力场的具象描述：成键



化学键的本质
与生化反应动
力学模拟

分子间相互作用与化学键

从力场到化学键

子璇的本原

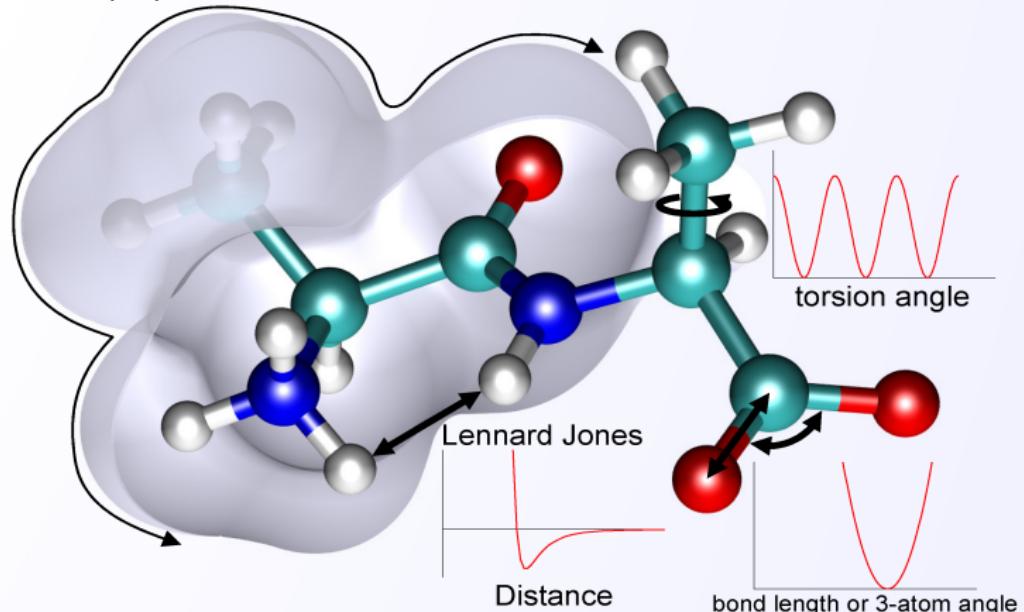
机理的模拟与
常用软件

QM/MM 计算软件

Hydrophobic effect is roughly proportional to surface area

Continuum solvent model

water



键与化学键

化学键的本质
与生化反应动力学模拟

分子间相互作用与化学键

蛋白质分子结构与活性位点

分子间相互作用与化学键

从力场到化学键

量子力学简介

能量量子化

Schrödinger 方程与量子力学的建立

量子力学与化学键的本质

分子轨道理论

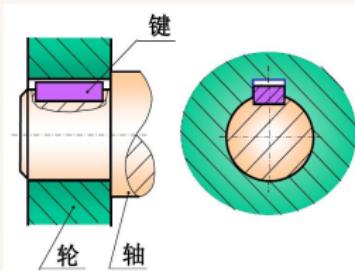
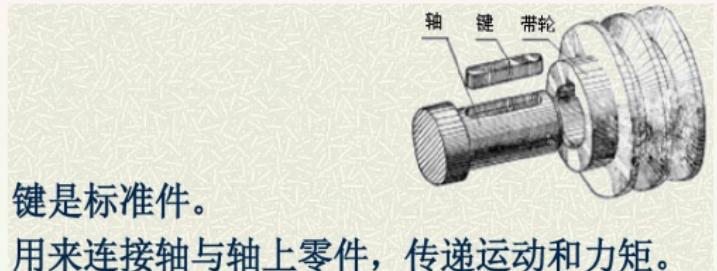
分子的稳定性与键级

化学键的本质

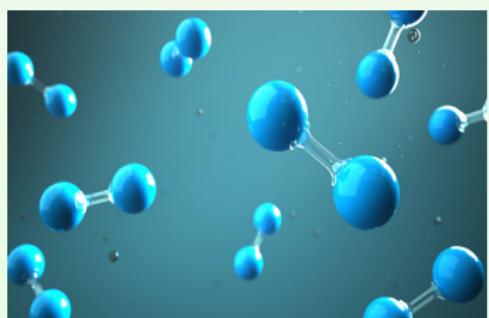
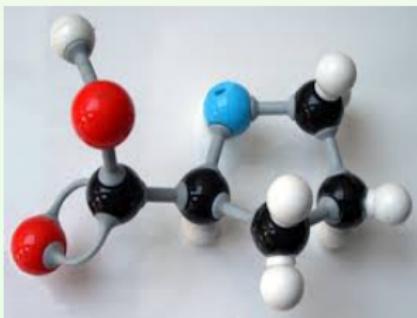
生物化学反应机理的模拟与常用软件

QM/MM 与酶化
学反应机理

QM/MM 计算软
件



化学键(chemical bond): 物质内部相邻两个或多个原子 (或离子) 间强烈的相互作用力的统称



化学键

化学键的本质
与生化反应动力学模拟

分子间相互作用与化学键

蛋白质分子结构与活性位点

分子间相互作用与化学键

从力场到化学键

量子力学简介

能量量子化

Schrödinger 方程与量子力学的建立

量子力学与化学键的本质

分子轨道理论

分子的稳定性与键级

化学键的本质

生物化学反应机理的模拟与常用软件

QM/MM 与酶化

学反应机理

QM/MM 计算软

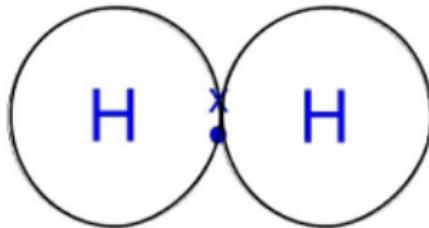
化学反应: 伴随旧的化学键的断裂和新的化学键的生成

Chemical Bonding

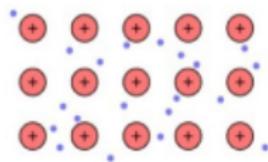
Ionic



Covalent



Metallic



对化学键本质的认知: 时代呼唤量子力学

黑体辐射与能量量子化

化学键的本质
与生化反应动力学模拟

分子间相互作用与化学键
蛋白质分子结构与活性位点
分子间相互作用与化学键
从力场到化学键

量子力学简介
能量量子化
Schrödinger 方程与量子力学的建立
量子力学与化学键的本质
分子轨道理论
分子的稳定性与键级
化学键的本质

生物化学反应机理的模拟与常用软件
QM/MM 与酶化学反应机理
QM/MM 计算软件

1900 年，为了解释黑体辐射 (black-body radiation) 的能量密度与辐射频率的关系，M. Planck 引入**能量量子化**的假设，利用统计物理推导出与实验符合得非常好的黑体辐射 Planck 公式：

$$\rho_{\nu} d\nu = \frac{8\pi h\nu^3}{C^3} \left(\frac{1}{e^{h\nu/kT} - 1} \right) d\nu$$

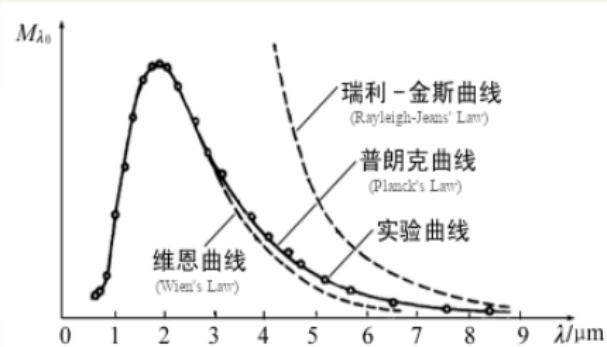
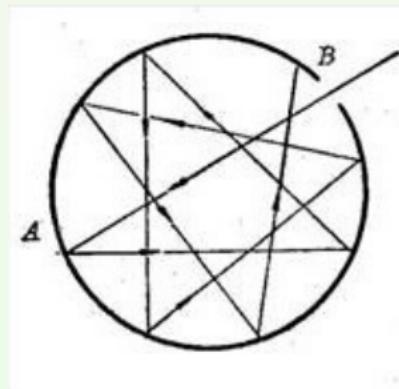


Fig.: The black-body radiation and the curve

波粒二象性与光电效应

化学键的本质
与生化反应动力学模拟

分子间相互作用
与化学键

蛋白质分子结构与活性位点

分子间相互作用与化学键

从力场到化学键

量子力学简介

能量量子化

Schrödinger 方程与量子力学的建立

量子力学与化学键的本质

分子轨道理论

分子的稳定性与键级

化学键的本质

生物化学反应机理的模拟与常用软件

QM/MM 与酶化
学反应机理

QM/MM 计算软
件

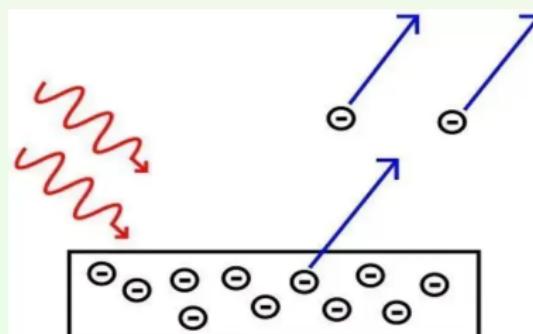
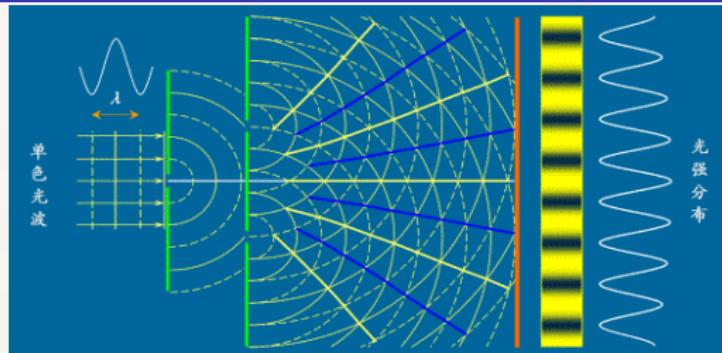


Fig.: The wave-particle duality and Photoelectric effect

电子衍射、Compton effect 与 H 原子光谱



化学键的本质
与生化反应动
力学模拟

分子间相互作用与化学键

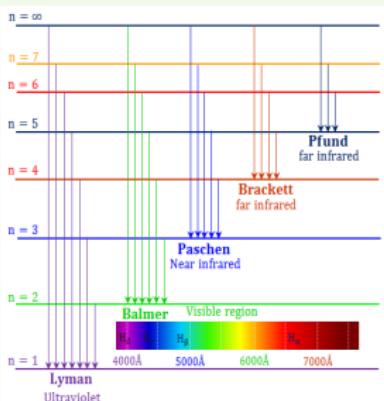
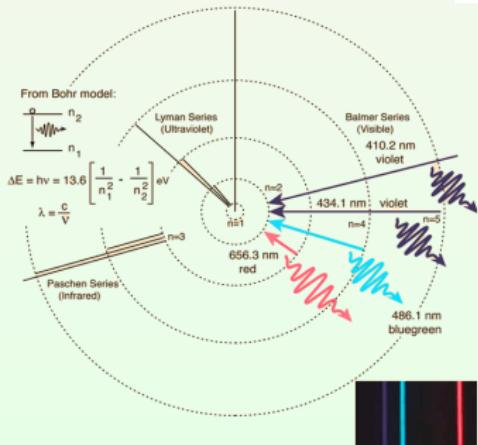
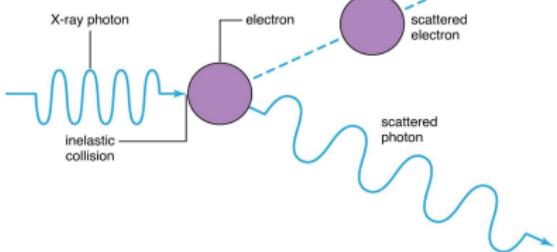
量子力学简介

能是量子化

生物化学反应
机理的模拟与
常用软件

The diagram illustrates a diffraction grating setup. A light source labeled I is positioned at a distance L from a slit of width d . The slit is located at a distance δ from a vertical axis. Red wavy lines represent waves emanating from the slit. The angle θ is measured between the central axis and one of these waves. The angle $\theta_{\text{min},0}$ is the minimum angle at which a wave can emerge from the slit, while $\theta_{\text{max},0}$ is the maximum angle. The angle θ is also shown with a downward arrow, indicating it can be measured in either direction from the central axis.

The Compton effect



De Broglie 物质波

化学键的本质
与生化反应动力学模拟

分子间相互作用与化学键

蛋白质分子结构与活性位点

分子间相互作用与化学键

从力场到化学键

量子力学简介

能量量子化

Schrödinger 方程与量子力学的建立

量子力学与化学键的本质

分子轨道理论

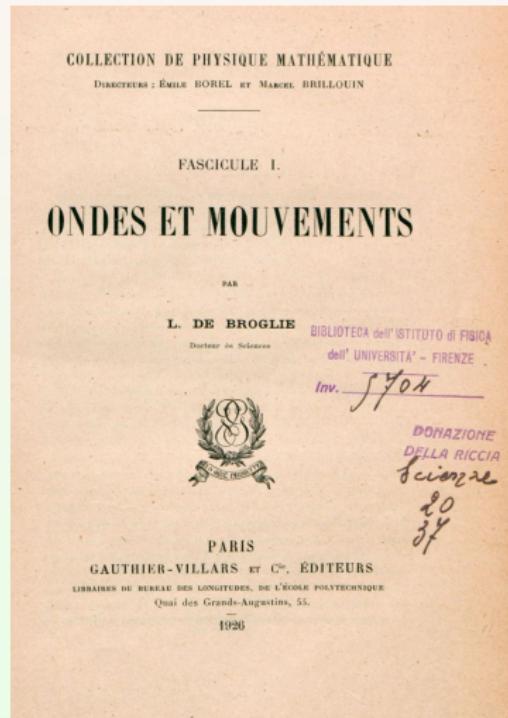
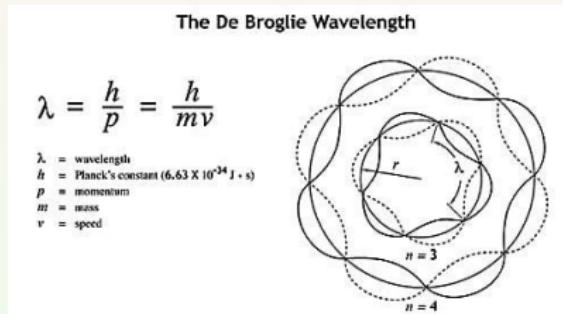
分子的稳定性与键级

化学键的本质

生物化学反应机理的模拟与常用软件

QM/MM 与酶化学反应机理

QM/MM 计算软件



经典的观念：

- 粒子：物质存在的形式
- 波动：能量传递的形式

驻波

化学键的本质
与生化反应动力学模拟

分子间相互作用与化学键

蛋白质分子结构与活性位点

分子间相互作用与化学键

从力场到化学键

量子力学简介

能量量子化

Schrödinger 方程与量子力学的建立

量子力学与化学键的本质

分子轨道理论

分子的稳定性与键级

化学键的本质

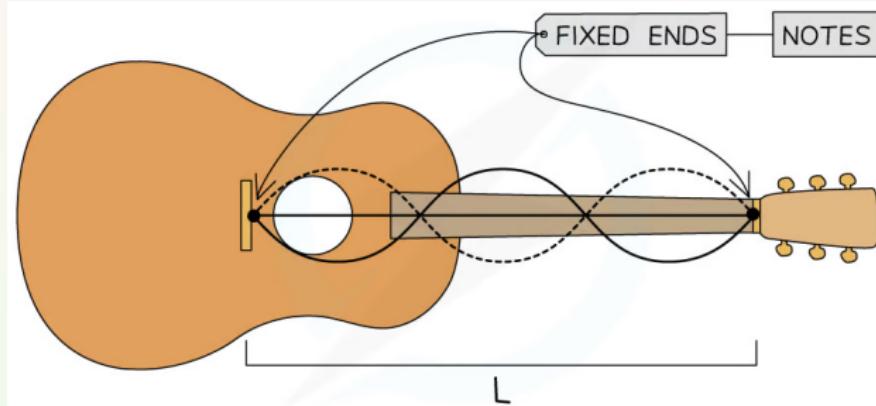
生物化学反应机理的模拟与常用软件

QM/MM 与酶化

学反应机理

QM/MM 计算软

件



驻波方程与势阱

化学键的本质
与生化反应动力学模拟

分子间相互作用
与化学键

蛋白质分子结构与活性位点

分子间相互作用与化学键

从力场到化学键

量子力学简介

能量量子化

Schrödinger 方程与量子力学的建立

量子力学与化学键的本质

分子轨道理论

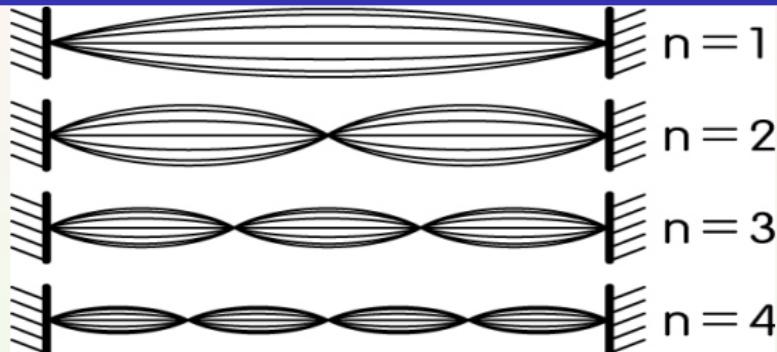
分子的稳定性与键级

化学键的本质

生物化学反应机理的模拟与常用软件

QM/MM 与酶化
学反应机理

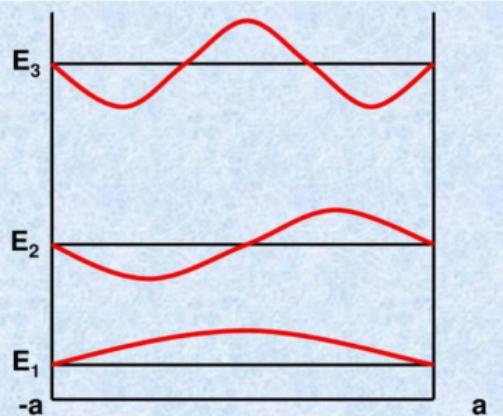
QM/MM 计算软
件



$$\frac{4a}{\lambda} = n, n = 1, 2, 3 \dots$$

$$p_n = \frac{h}{\lambda} = \frac{nh}{4a}$$

$$E_n = \frac{p_n^2}{2\mu} = \frac{n^2 h^2}{32\mu a^2} = \frac{n^2 h^2 \pi^2}{8\mu a^2}$$



原子中电子的驻波方程

化学键的本质
与生化反应动力学模拟

分子间相互作用与化学键

蛋白质分子结构与活性位点

分子间相互作用与化学键

从力场到化学键

量子力学简介

能量量子化

Schrödinger 方程与量子力学的建立

量子力学与化学键的本质

分子轨道理论

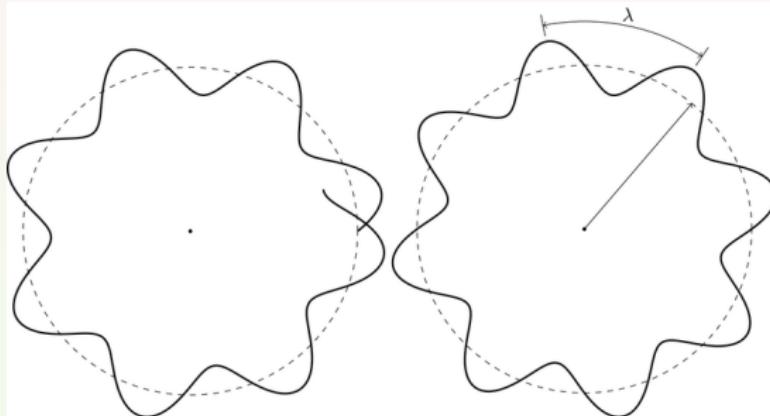
分子的稳定性与键级

化学键的本质

生物化学反应机理的模拟与常用软件

QM/MM 与酶化学反应机理

QM/MM 计算软件



原子中的电子轨道和能量

化学键的本质
与生化反应动力学模拟

分子间相互作用与化学键

蛋白质分子结构与活性位点

分子间相互作用与化学键

从力场到化学键

量子力学简介

能量量子化

Schrödinger 方程与量子力学的建立

量子力学与化学键的本质

分子轨道理论

分子的稳定性与键级

化学键的本质

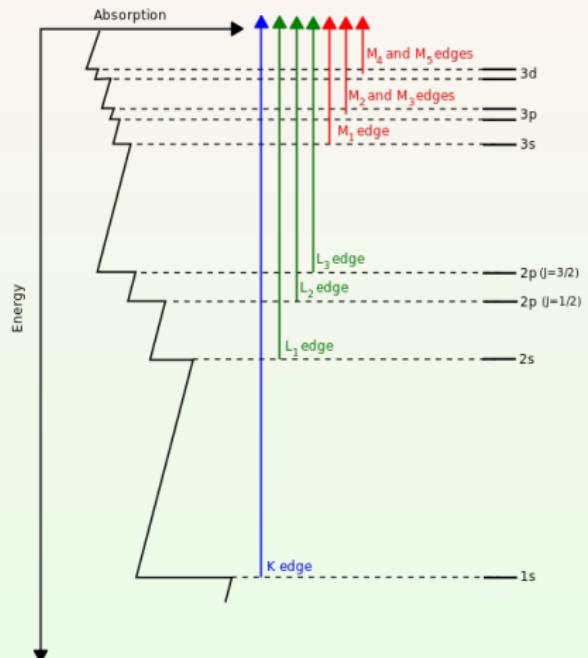
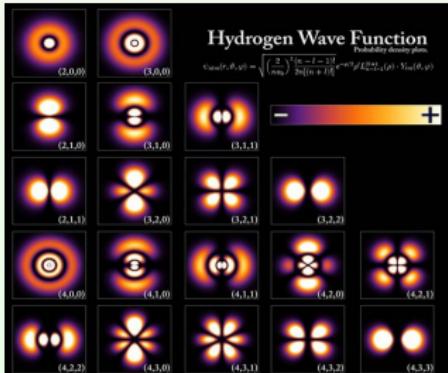
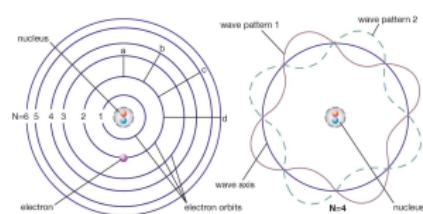
生物化学反应机理的模拟与常用软件

QM/MM 与酶化

学反应机理

QM/MM 计算软

Models of atomic structure





Schrödinger 方程

化学键的本质
与生化反应动力学模拟

分子间相互作用与化学键

蛋白质分子结构与活性位点

分子间相互作用与化学键

从力场到化学键

量子力学简介

能量量子化

Schrödinger 方程与量子力学的建立

量子力学与化学键的本质

分子轨道理论

分子的稳定性与键级
化学键的本质

生物化学反应机理的模拟与常用软件

QM/MM 与酶化
学反应机理

QM/MM 计算软
件

Second Series

December, 1926

Vol. 28, No. 6

THE

PHYSICAL REVIEW

AN UNDULATORY THEORY OF THE MECHANICS OF ATOMS AND MOLECULES

BY E. SCHRÖDINGER

ABSTRACT

The paper gives an account of the author's work on a new form of quantum theory. §1. The Hamiltonian analogy between mechanics and optics. §2. The analogy is to be extended to include real "physical" or "undulatory" mechanics instead of mere geometrical mechanics. §3. The significance of wave-length: macro-mechanical and micro-mechanical problems. §4. The wave-equation and its application to the hydrogen atom. §5. The intrinsic reason for the appearance of discrete characteristic frequencies. §6. Other problems; intensity of emitted light. §7. The wave-equation derived from a Hamiltonian variation-principle: generalization to an arbitrary conservative system. §8. The wave-

$$\text{Kinetic Energy} + \text{Potential Energy} = E$$

Classical Conservation of Energy Newton's Laws

$$\frac{1}{2}mv^2 + \frac{1}{2}kx^2 = E$$

$$F = ma = -kx$$

Harmonic oscillator example.

Quantum Conservation of Energy Schrodinger Equation

In making the transition to a wave equation, physical variables take the form of "operators".

$$P \rightarrow \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$$

$$H \rightarrow \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2} kx^2$$

The energy becomes the Hamiltonian operator

$H\Psi = E\Psi$

Wavefunction

Energy "eigenvalue" for the system.

The form of the Hamiltonian operator for a quantum harmonic oscillator.

17 Equations That Changed the World by Ian Stewart

- | | | |
|----------------------------------|---|----------------------------|
| 1. Pythagoras's Theorem | $a^2 + b^2 = c^2$ | Pythagoras, 530 BC |
| 2. Logarithms | $\log xy = \log x + \log y$ | John Napier, 1610 |
| 3. Calculus | $\frac{df}{dt} = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(t+h) - f(t)}{h}$ | Newton, 1668 |
| 4. Law of Gravity | $F = G \frac{m_1 m_2}{r^2}$ | Newton, 1687 |
| 5. The Square Root of Minus One | $i^2 = -1$ | Euler, 1750 |
| 6. Euler's Formula for Polyhedra | $V - E + F = 2$ | Euler, 1751 |
| 7. Normal Distribution | $\Phi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\rho}} e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\rho^2}}$ | C.F. Gauss, 1810 |
| 8. Wave Equation | $\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = c^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$ | J. d'Alembert, 1746 |
| 9. Fourier Transform | $f(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{-2\pi i \omega x} dx$ | J. Fourier, 1822 |
| 10. Navier-Stokes Equation | $\rho \left(\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} \right) = -\nabla p + \nabla \cdot \mathbf{T} + \mathbf{f}$ | C. Navier, G. Stokes, 1845 |
| 11. Maxwell's Equations | $\nabla \cdot \mathbf{E} = 0$
$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}$
$\nabla \cdot \mathbf{H} = 0$
$\nabla \times \mathbf{H} = \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t}$ | J.C. Maxwell, 1865 |
| 12. Second Law of Thermodynamics | $dS \geq 0$ | L. Boltzmann, 1874 |
| 13. Relativity | $E = mc^2$ | Einstein, 1905 |
| 14. Schrodinger's Equation | $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = H\Psi$ | E. Schrodinger, 1927 |
| 15. Information Theory | $H = -\sum p(x) \log p(x)$ | C. Shannon, 1949 |
| 16. Chaos Theory | $x_{t+1} = kx_t(1-x_t)$ | Robert May, 1975 |
| 17. Black-Scholes Equation | $\frac{1}{2} \sigma^2 S^2 \frac{\partial^2 V}{\partial S^2} + rS \frac{\partial V}{\partial S} + \frac{\partial V}{\partial t} - rV = 0$ | F. Black, M. Scholes, 1990 |

量子力学的奠基人

化学键的本质
与生化反应动力学模拟

分子间相互作用与化学键

蛋白质分子结构与活性位点

分子间相互作用与化学键

从力场到化学键

量子力学简介

能量量子化

Schrödinger 方程与量子力学的建立

量子力学与化学键的本质

分子轨道理论

分子的稳定性与键级
化学键的本质

生物化学反应机理的模拟与常用软件

QM/MM 与酶化
学反应机理

QM/MM 计算软
件

INSTITUT INTERNATIONAL DE PHYSIQUE SOLVAY
CINQUIÈME CONGRÈS DE PHYSIQUE — BRUXELLES, 1927



A. PICCARD E. HENRIOT P. EHRENFEST ED. HERZEN TH. DE DONDER E. SCHRÖDINGER E. VERSCHAFFELT W. PAULI W. HEISENBERG R.H. FOWLER L. BRILLOUIN
 P. DEBYE M. KNUDSEN W.L. BRAGG H.A. KRAMERS P.A.M. DIRAC A.H. COMPTON L. DE BROGLIE M. BORN N. BOHR
 I. LANGMUIR M. PLANCK Mme CURIE H.A. LORENTZ A. SHERRIN P. LANGEVIN C.J. GUNN E.T.A. WILSON D.W. RICHARDSON
 Annex : Sir R.H. BRAGG, H. DESLANDRES et VAN HAREN

Fig.: The Fifth Solvay International Conference, Brussels, Belgium, Oct. 1927

前排左起: I.Langmuir(朗缪尔) M.Planck(普朗克) Marie Curie(居里夫人) H.Lorentz(洛伦兹) A.Einstein(爱因斯坦) P.Langevin(朗之万) Ch.E.Guye(古伊) C.T.R.Wilson(威尔逊) O.W.Richardson(理查森)

中排左起: P.Debye(德拜) M.Knudsen(克努森) W.L.Bragg(布拉格) H.A.Kramers(克莱默) P.A.M.Dirac(狄拉克) A.H.Compton(康普顿) L.de Broglie(德布罗意) M.Born(玻恩) N.Bohr(玻尔)

后排左起: A.Piccard(皮卡尔德) E.Henriot(亨利厄特) P.Ehrenfest(埃伦费斯特) Ed.Herzen(赫尔岑) Th.de Donder(德唐德) E.Schrödinger(薛定谔) E.Verschaffelt(费尔夏费尔特) W.Pauli(泡利) W.Heisenberg(海森堡) R.H.Fowler(富勒) L.Brillouin(布里渊)

态叠加原理: Schrödinger's cat

化学键的本质
与生化反应动力学模拟

分子间相互作用与化学键

蛋白质分子结构与活性位点

分子间相互作用与化学键

从力场到化学键

量子力学简介

能量量子化

Schrödinger 方程与量子力学的建立

量子力学与化学键的本质

分子轨道理论

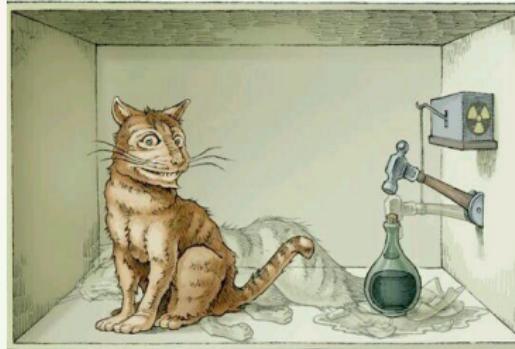
分子的稳定性与键级

化学键的本质

生物化学反应机理的模拟与常用软件

QM/MM 与酶化学反应机理

QM/MM 计算软件



Schroedinger's Cat

There's a cat in a box, that has like a 50/50 chance of living, because there's a vial of poison, that's also in the box. so regular physics would say that it's one or the other, the cat is either alive or dead. but the quantum physics says that both realities exist simultaneously. it's only when you open the box that they collapse into a single event.

WHAT IS LIFE?

The Physical Aspect of the Living Cell

BY
ERWIN SCHRÖDINGER

SENIOR PROFESSOR AT THE DUBLIN INSTITUTE FOR ADVANCED STUDIES

Based on Lectures delivered under the auspices of the Institute of Trinity College, Dublin,
in February 1943

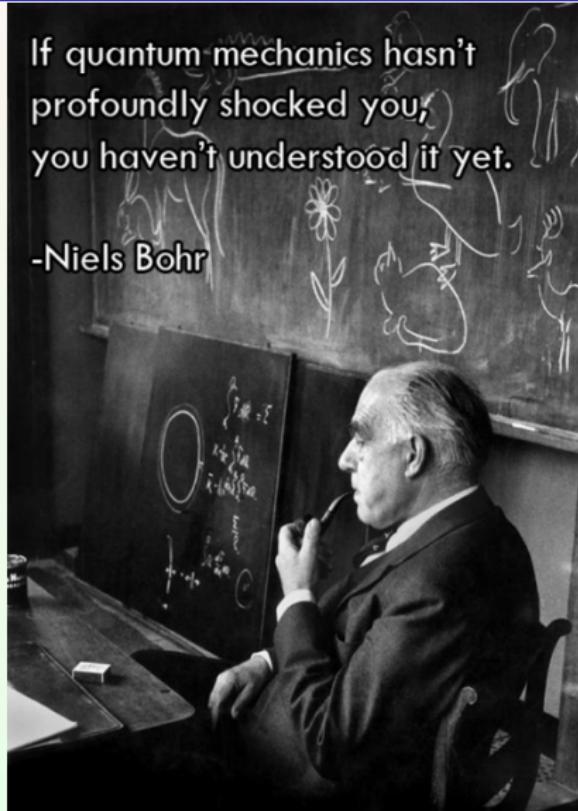


4339

CAMBRIDGE
AT THE UNIVERSITY PRESS

1948

量子力学量力学



化学键的本质
与生化反应动力学模拟

分子间相互作用与化学键

蛋白质分子结构与活性位点

分子间相互作用与化学键

从力场到化学键

量子力学简介

能量量子化

Schrödinger 方程与量子力学的建立

量子力学与化学键的本质

分子轨道理论

分子的稳定性与键级

化学键的本质

生物化学反应机理的模拟与常用软件

QM/MM 与酶化学生理机理

QM/MM 计算软件

几何原本：公理体系的源头



化学键的本质
与生化反应动
力学模拟

分子间相互作用与化学键

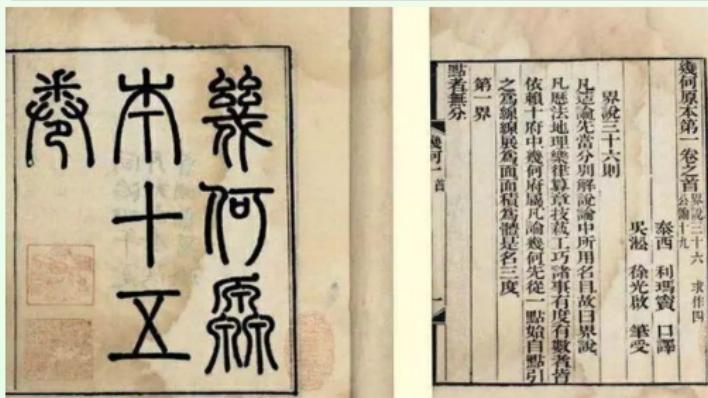
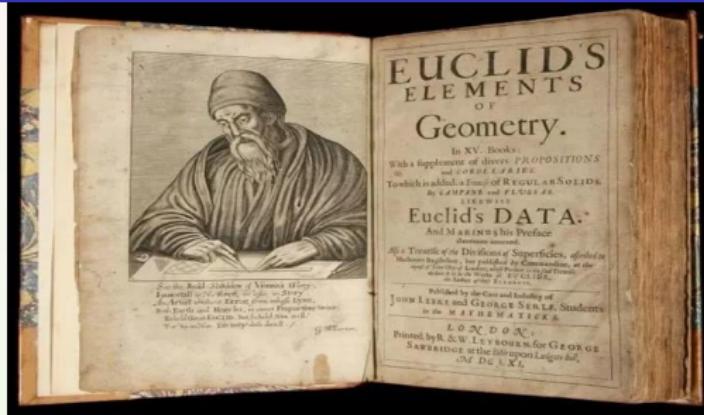
能量量子化

Schrödinger 方
程与量子力学的建立

字键的本底

生物化学反应

机理的模拟与 常用软件



公理体系：现代科学的逻辑起点

化学键的本质
与生化反应动力学模拟

分子间相互作用与化学键

蛋白质分子结构与活性位点

分子间相互作用与化学键

从力场到化学键

量子力学简介

能量量子化

Schrödinger 方程与量子力学的建立

量子力学与化学键的本质

分子轨道理论

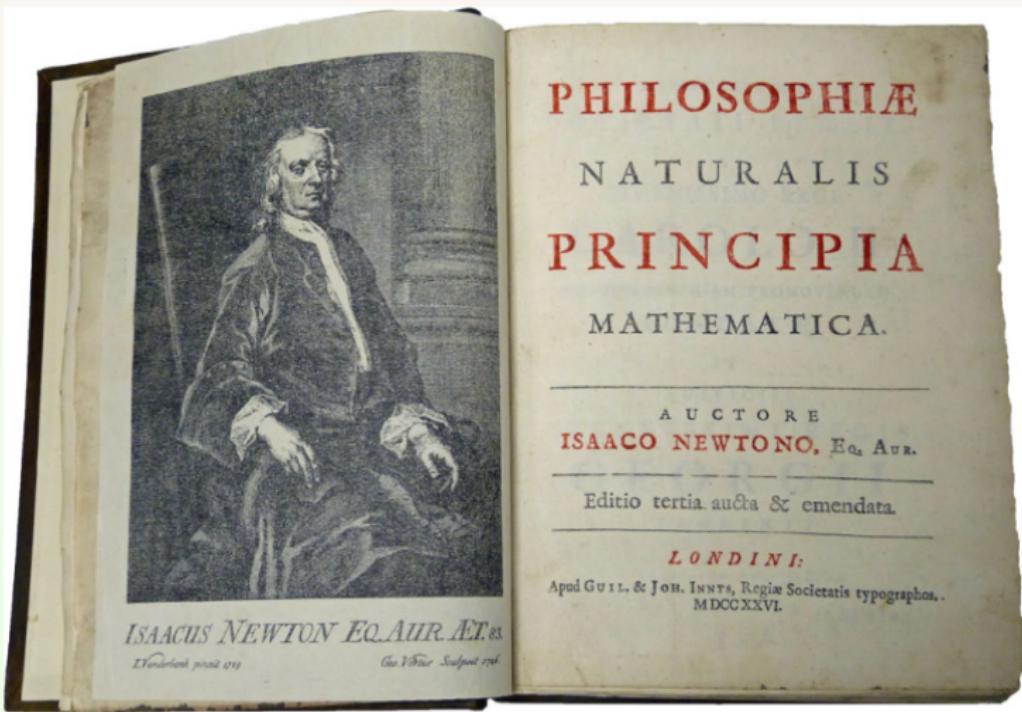
分子的稳定性与键级

化学键的本质

生物化学反应机理的模拟与常用软件

QM/MM 与酶化学反应机理

QM/MM 计算软件



量子力学基本假设 (公理体系)

化学键的本质
与生化反应动力学模拟

分子间相互作用与化学键

蛋白质分子结构与活性位点

分子间相互作用与化学键

从力场到化学键

量子力学简介

能量量子化

Schrödinger 方程与量子力学的建立

量子力学与化学键的本质

分子轨道理论

分子的稳定性与键级

化学键的本质

生物化学反应机理的模拟与常用软件

QM/MM 与酶化学生理机理

QM/MM 计算软件

■ 波函数假设

微观体系的运动状态可由波函数 Ψ 完全描述，波函数包含体系的所有性质

波函数 Ψ 一般要求满足连续、有限和单值三个条件

■ 全同粒子假设

全同粒子组成的体系中，两个全同粒子相互调换不改变体系的状态

全同粒子是指内禀性质完全相同的一类微观粒子：

例如，所有的电子是全同粒子

■ 态叠加原理

如果 Ψ_1 是体系的一个本征态，对应的本征值为 A_1 ， Ψ_2 也是体系的一个本征态，对应的本征值为 A_2 ，则

$$\Psi = C_1 \Psi_1 + C_2 \Psi_2$$

也是体系一个可能的存在状态

量子力学基本假设 (续)

化学键的本质
与生化反应动力学模拟

分子间相互作用与化学键
蛋白质分子结构与活性位点

分子间相互作用与化学键
从力场到化学键

量子力学简介
能量量子化

Schrödinger 方程与量子力学的建立

量子力学与化学键的本质
分子轨道理论

分子的稳定性与键级
化学键的本质

生物化学反应机理的模拟与常用软件
QM/MM 与酶化

学反应机理
QM/MM 计算软件

■ 力学量算符假设

经典力学中的物理量对应到量子力学中，要用线性 Hermite 算符表示(Hermite 算符的本征函数构成完备空间)
如动量算符

$$\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \nabla$$

位置算符

$$\hat{\mathbf{r}} = \mathbf{r}$$

力学量算符之间有确定的对易关系 (量子条件)

$$[\hat{\mathbf{F}}, \hat{\mathbf{G}}] = \hat{\mathbf{F}}\hat{\mathbf{G}} - \hat{\mathbf{G}}\hat{\mathbf{F}}$$

■ 微观体系的运动状态波函数随时间变化的规律： 遵从 Schrödinger 方程

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\Psi\rangle = \hat{\mathbf{H}} |\Psi\rangle$$

量子化学学科创立

化学键的本质
与生化反应动力学模拟

分子间相互作用与化学键

蛋白质分子结构与活性位点

分子间相互作用与化学键

从力场到化学键

量子力学简介

能量量子化

Schrödinger 方程与量子力学的建立

量子力学与化学键的本质

分子轨道理论

分子的稳定性与键级

化学键的本质

生物化学反应机理的模拟与常用软件

QM/MM 与酶化
学反应机理

QM/MM 计算软
件

- 1927 年, ø. Burrau 应用量子力学原理, 完成 H_2^+ 离子的计算
- 同年, Walter Heitlery 和 Fritz W. London 对 H_2 分子的计算, 标志着量子化学这一学科正式创立



Fig.: W. Heitlery (left) and F. W. London(right).

H₂ 分子轨道

化学键的本质
与生化反应动力学模拟

分子间相互作用与化学键

蛋白质分子结构与活性位点

分子间相互作用与化学键

从力场到化学键

量子力学简介

能量量子化

Schrödinger 方程与量子力学的建立

量子力学与化学键的本质

分子轨道理论

分子的稳定性与键级

化学键的本质

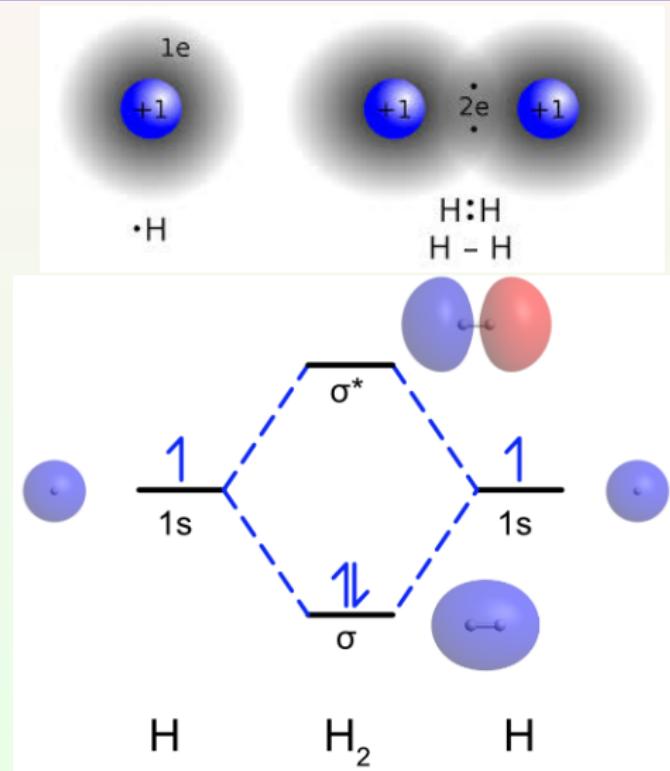
生物化学反应机理的模拟与常用软件

QM/MM 与酶化

学反应机理

QM/MM 计算软

件



原子核外电子排布

化学键的本质
与生化反应动力学模拟

分子间相互作用
与化学键

蛋白质分子结构与活性位点

分子间相互作用与化
学键

从力场到化学键

量子力学简介

能量量子化

Schrödinger 方
程与量子力学的建立

量子力学与化
学键的本质

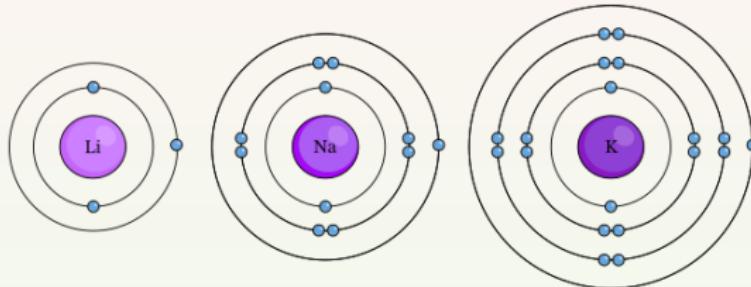
分子轨道理论

分子的稳定性与键级
化学键的本质

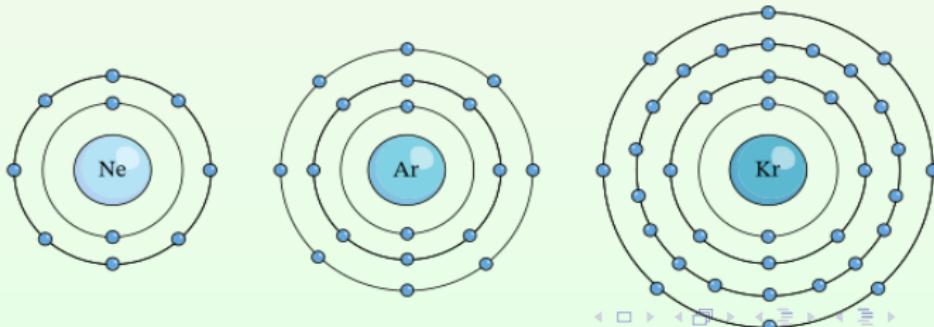
生物化学反应
机理的模拟与
常用软件

QM/MM 与酶化
学反应机理

QM/MM 计算软
件



These atoms have 8 electrons in their outermost shell



O₂ 分子轨道

化学键的本质
与生化反应动
力学模拟

分子间相互作
用与化学键

蛋白质分子结构与活
性位点

分子间相互作用与化
学键

从力场到化学键

量子力学简介

能量量子化

Schrödinger 方
程与量子力学的建立

量子力学与化
学键的本质

分子轨道理论

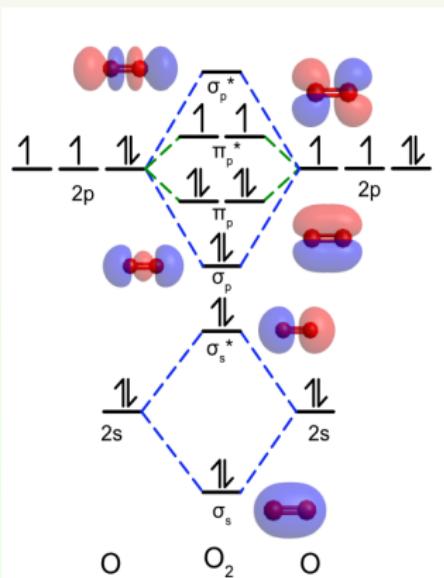
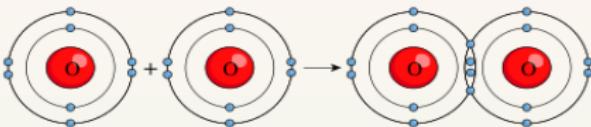
分子的稳定性与键级

化学键的本质

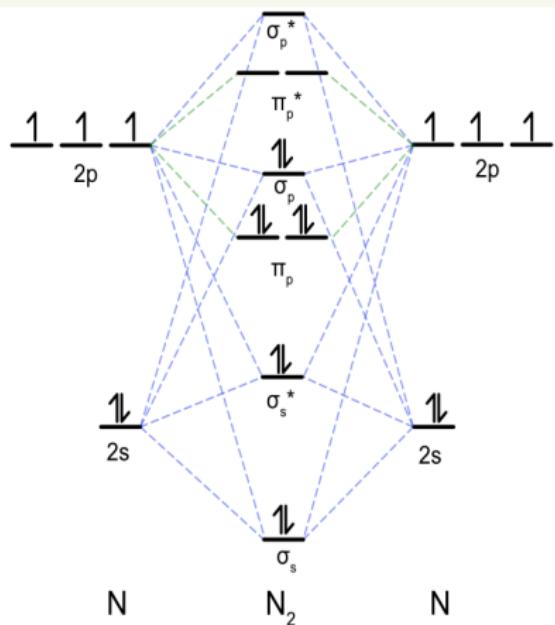
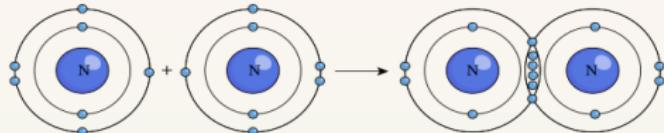
生物化学反应
机理的模拟与
常用软件

QM/MM 与酶化
学反应机理

QM/MM 计算软
件



N₂ 分子轨道



共价化合物的分子轨道

化学键的本质
与生化反应动力学模拟

分子间相互作用与化学键

蛋白质分子结构与活性位点

分子间相互作用与化学键

从力场到化学键

量子力学简介

能量量子化

Schrödinger 方程与量子力学的建立

量子力学与化学键的本质

分子轨道理论

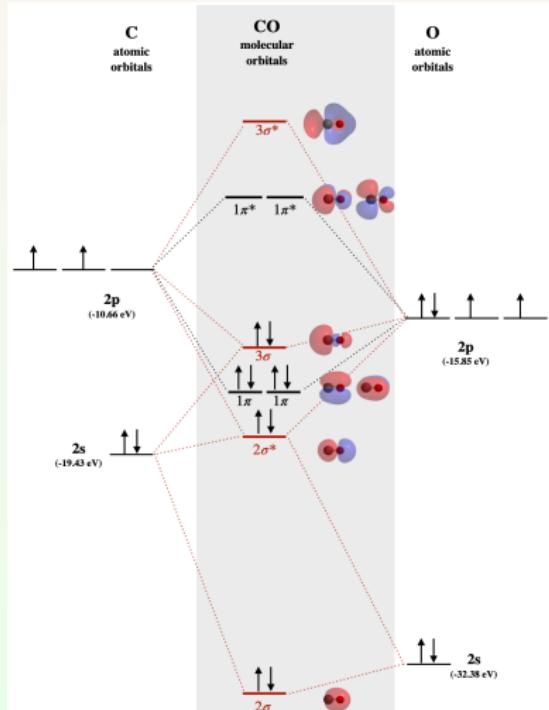
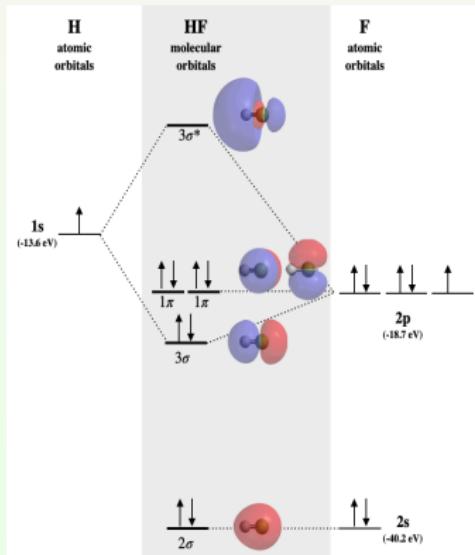
分子的稳定性与键级

化学键的本质

生物化学反应机理的模拟与常用软件

QM/MM 与酶化学反应机理

QM/MM 计算软件



分子轨道与键强度

化学键的本质
与生化反应动力学模拟

分子间相互作用与化学键

蛋白质分子结构与活性位点

分子间相互作用与化学键

从力场到化学键

量子力学简介

能量量子化

Schrödinger 方程与量子力学的建立

量子力学与化学键的本质

分子轨道理论

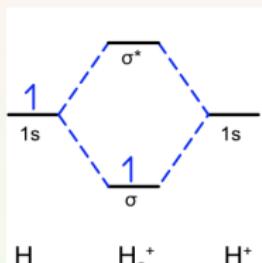
分子的稳定性与键级

化学键的本质

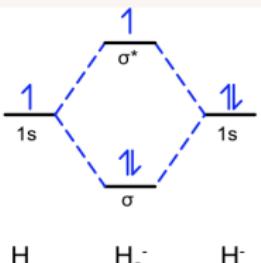
生物化学反应机理的模拟与常用软件

QM/MM 与酶化
学反应机理

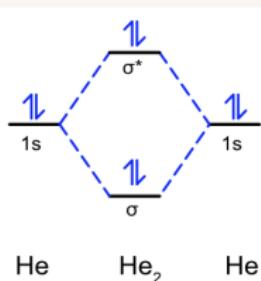
QM/MM 计算软
件



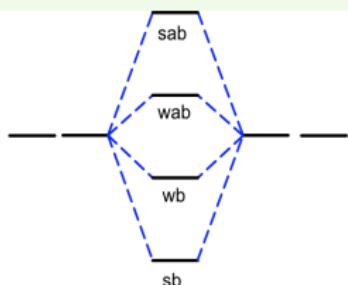
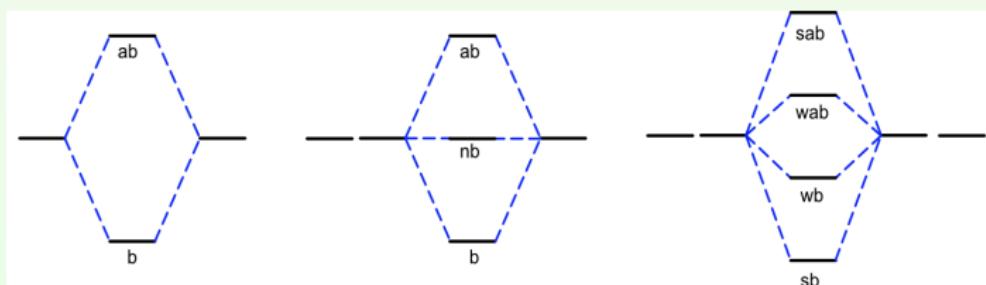
Bond order = 0.5



Bond order = 0.5



Bond order = 0



键级的估算

化学键的本质
与生化反应动力学模拟

分子间相互作用
与化学键

蛋白质分子结构与活性位点

分子间相互作用与化学键
从力场到化学键

量子力学简介

能量量子化

Schrödinger 方程与量子力学的建立

量子力学与化学键的本质

分子轨道理论

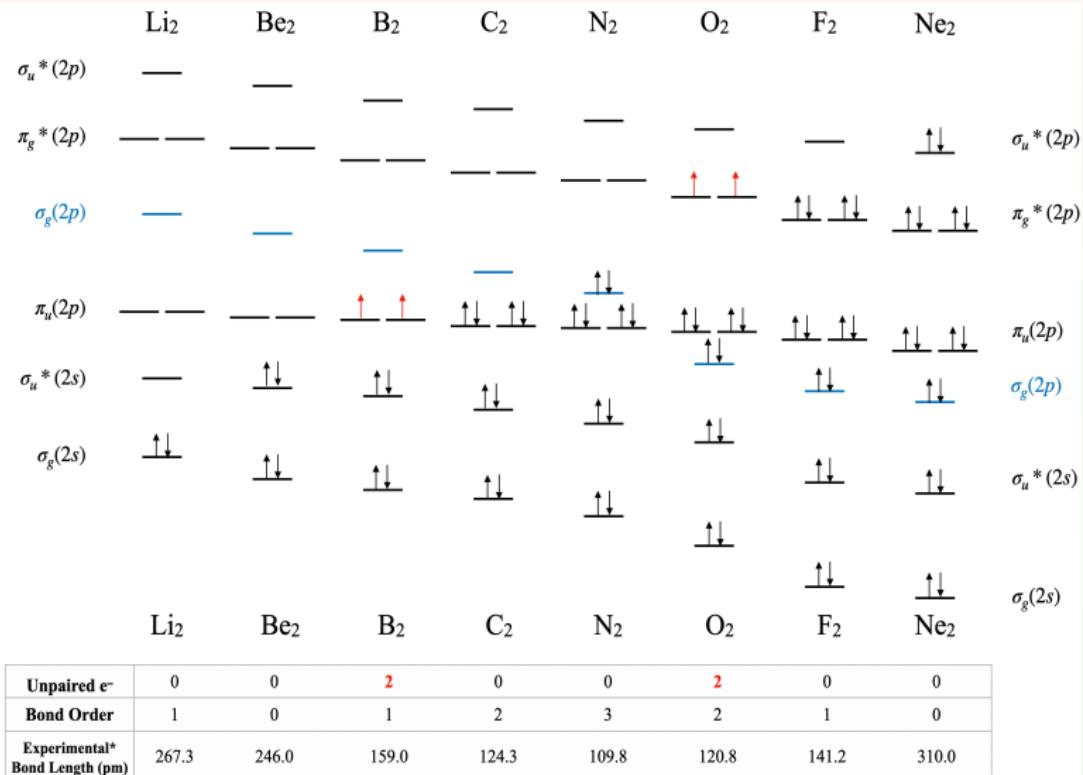
分子的稳定性与键级

化学键的本质

生物化学反应机理的模拟与常用软件

QM/MM 与酶化学反应机理

QM/MM 计算软件



*Experimental bond lengths from "List of Experimental Diatomic Bond Lengths", NIST, <https://cccbdb.nist.gov/diatomicexpbondx.asp>

键级的估算

化学键的本质
与生化反应动力学模拟

分子间相互作用与化学键

蛋白质分子结构与活性位点

分子间相互作用与化学键

从力场到化学键

量子力学简介

能量量子化

Schrödinger 方程与量子力学的建立

量子力学与化学键的本质

分子轨道理论

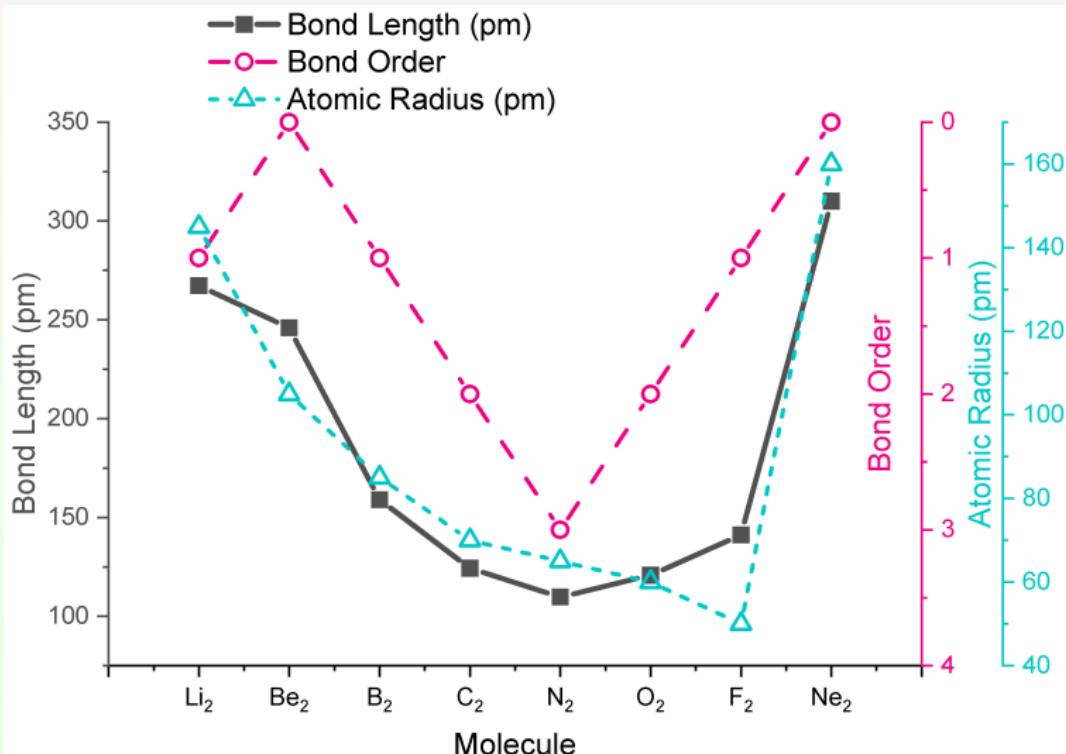
分子的稳定性与键级

化学键的本质

生物化学反应机理的模拟与常用软件

QM/MM 与酶化学反应机理

QM/MM 计算软件



轨道杂化与分子结构

化学键的本质
与生化反应动力学模拟

分子间相互作用
与化学键

蛋白质分子结构与活性位点

分子间相互作用与化
学键

从力场到化学键

量子力学简介

能量量子化

Schrödinger 方
程与量子力学的建立

量子力学与化
学键的本质

分子轨道理论

分子的稳定性与键级
化学键的本质

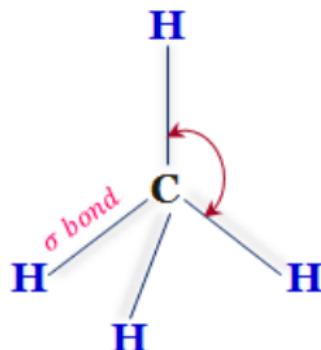
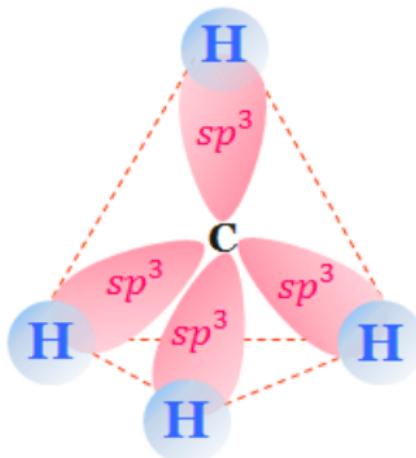
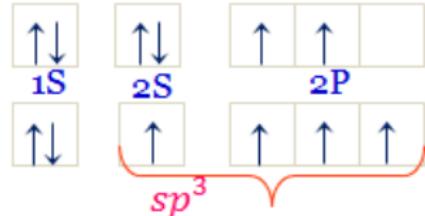
生物化学反应
机理的模拟与
常用软件

QM/MM 与酶化
学反应机理

QM/MM 计算软
件

Ground state
Exited state

Energy



化学键的本质

化学键的本质
与生化反应动
力学模拟

分子间相互作
用与化学键

蛋白质分子结构与活
性位点

分子间相互作用与化
学键

从力场到化学键

量子力学简介

能量量子化

Schrödinger 方
程与量子力学的建立

量子力学与化
学键的本质

分子轨道理论

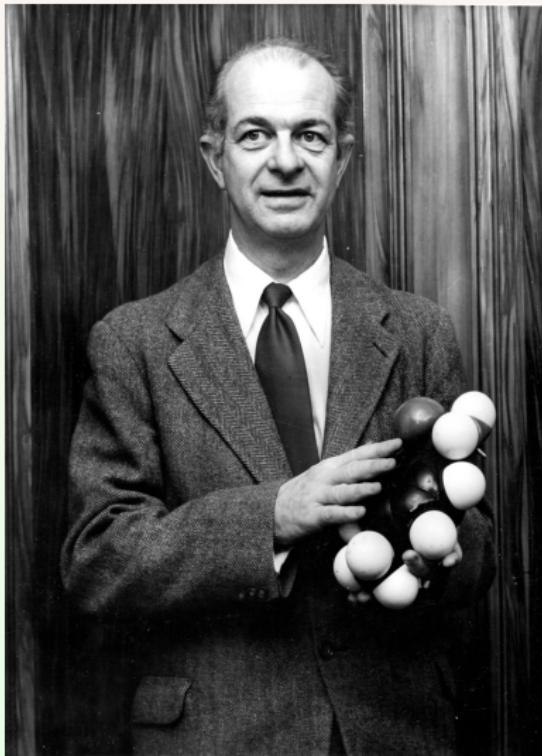
分子的稳定性与键级

化学键的本质

生物化学反应
机理的模拟与
常用软件

QM/MM 与酶化
学反应机理

QM/MM 计算软
件



THE NATURE OF
THE CHEMICAL BOND
AND THE STRUCTURE OF
MOLECULES AND CRYSTALS:
An Introduction to Modern Structural Chemistry
BY LINUS PAULING

THIRD EDITION

CORNELL UNIVERSITY PRESS
Ithaca, New York

分子轨道与价键

化学键的本质
与生化反应动力学模拟

分子间相互作用与化学键

蛋白质分子结构与活性位点

分子间相互作用与化学键

从力场到化学键

量子力学简介

能量量子化

Schrödinger 方程与量子力学的建立

量子力学与化学键的本质

分子轨道理论

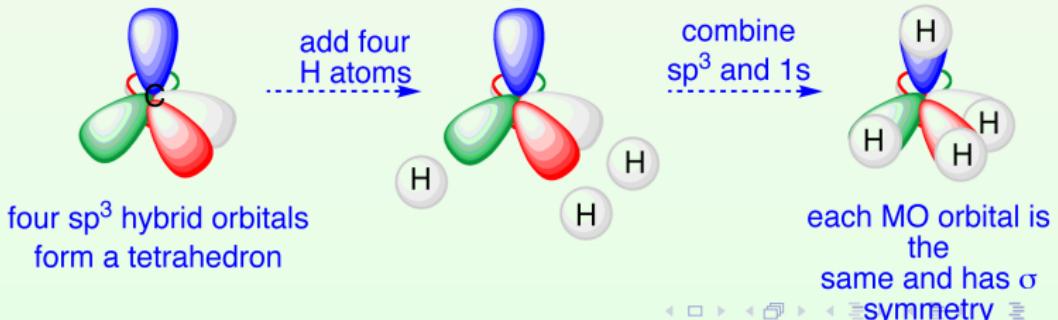
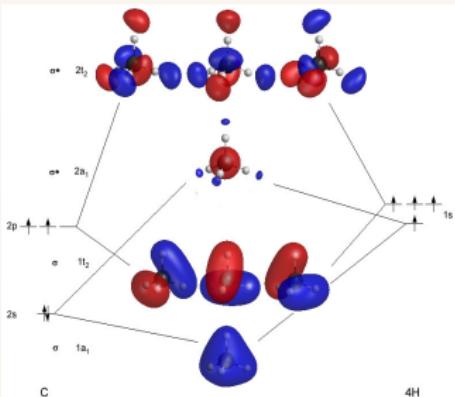
分子的稳定性与键级

化学键的本质

生物化学反应机理的模拟与常用软件

QM/MM 与酶化
学反应机理

QM/MM 计算软
件



分子轨道与价键

化学键的本质
与生化反应动力学模拟

分子间相互作用与化学键

蛋白质分子结构与活性位点

分子间相互作用与化学键

从力场到化学键

量子力学简介

能量量子化

Schrödinger 方程与量子力学的建立

量子力学与化学键的本质

分子轨道理论

分子的稳定性与键级

化学键的本质

生物化学反应机理的模拟与常用软件

QM/MM 与酶化
学反应机理

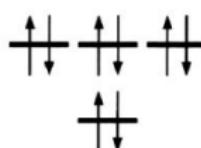
QM/MM 计算软
件

VBT prediction

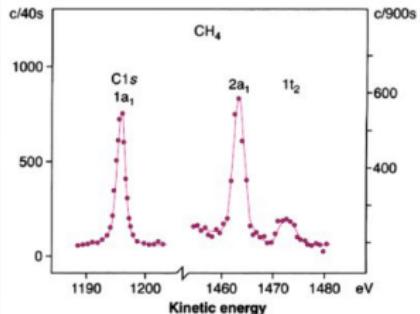


Four equal energy C—H bonds from sp^3 hybrids on C predicts a single valence ionization potential

MOT prediction



MOT gives a low energy MO and three degenerate MOs, leading to two valence ionization potentials



Ionization potentials of methane measured by photoelectron spectroscopy

分子轨道与价键

化学键的本质
与生化反应动力学模拟

分子间相互作用与化学键

蛋白质分子结构与活性位点

分子间相互作用与化学键

从力场到化学键

量子力学简介

能量量子化

Schrödinger 方程与量子力学的建立

量子力学与化学键的本质

分子轨道理论

分子的稳定性与键级

化学键的本质

生物化学反应机理的模拟与常用软件

QM/MM 与酶化学反应机理

QM/MM 计算软件

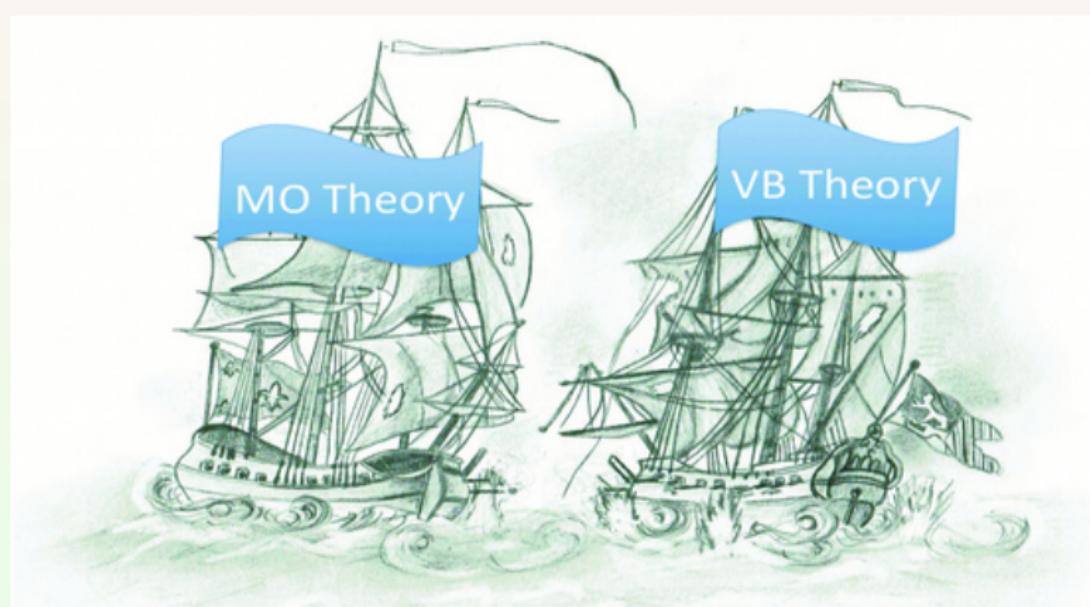


Fig.: 分子轨道理论 .vs. 价键理论: 横看成岭侧成峰

前线轨道:HOMO-LUMO

化学键的本质
与生化反应动
力学模拟

分子间相互作
用与化学键

蛋白质分子结构与活
性位点

分子间相互作用与化
学键

从力场到化学键

量子力学简介

能量量子化

Schrödinger 方
程与量子力学的建立

量子力学与化
学键的本质

分子轨道理论

分子的稳定性与键级

化学键的本质

生物化学反应
机理的模拟与
常用软件

QM/MM 与酶化
学反应机理

QM/MM 计算软
件

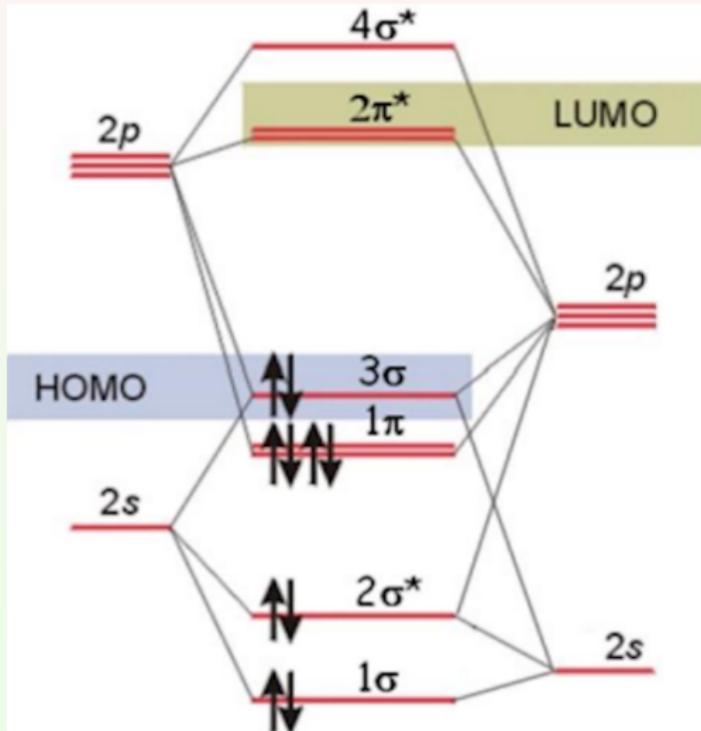


Fig.: The schematic diagram of HOMO-LUMO of CO₂.

复杂分子的前线轨道:HOMO

化学键的本质
与生化反应动力学模拟

分子间相互作用与化学键

蛋白质分子结构与活性位点

分子间相互作用与化学键

从力场到化学键

量子力学简介

能量量子化

Schrödinger 方程与量子力学的建立

量子力学与化学键的本质

分子轨道理论

分子的稳定性与键级

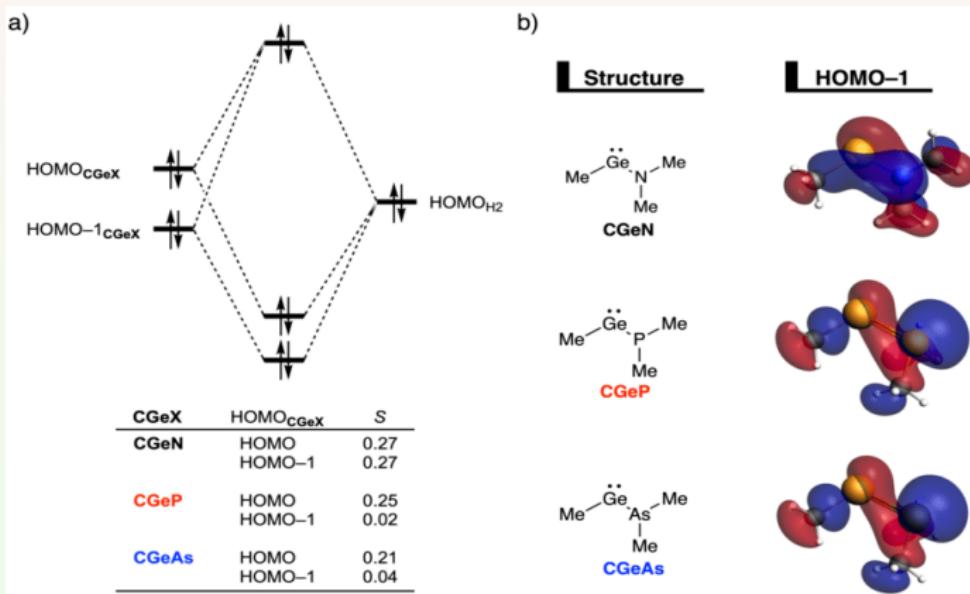
化学键的本质

生物化学反应机理的模拟与常用软件

QM/MM 与酶化

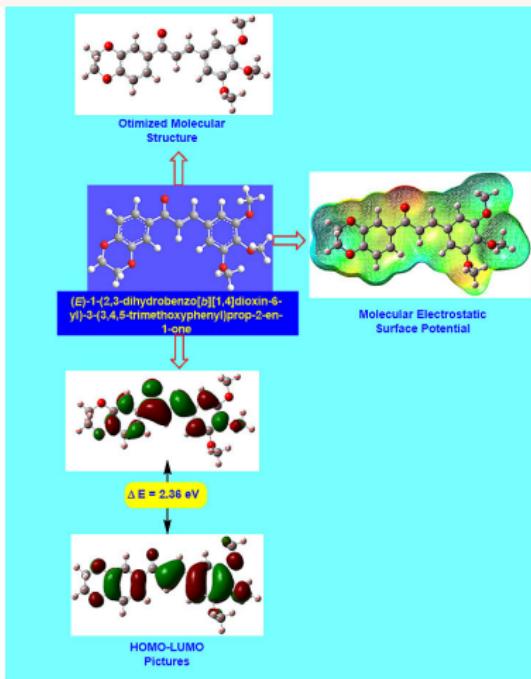
学反应机理

QM/MM 计算软



HOMO: the Highest Occupied Molecular Orbital

复杂分子的前线轨道:LUMO



化学键的本质
与生化反应动力学模拟

分子间相互作用与化学键

蛋白质分子结构与活性位点

分子间相互作用与化学键

从力场到化学键

量子力学简介

能量量子化

Schrödinger 方程与量子力学的建立

量子力学与化学键的本质

分子轨道理论

分子的稳定性与键级

化学键的本质

生物化学反应机理的模拟与常用软件

QM/MM 与酶化

学反应机理

QM/MM 计算软

LUMO: the Lowest Unoccupied Molecular Orbital

前线轨道与化学反应

化学键的本质
与生化反应动力学模拟

分子间相互作用与化学键

蛋白质分子结构与活性位点

分子间相互作用与化学键

从力场到化学键

量子力学简介

能量量子化

Schrödinger 方程与量子力学的建立

量子力学与化学键的本质

分子轨道理论

分子的稳定性与键级

化学键的本质

生物化学反应机理的模拟与常用软件

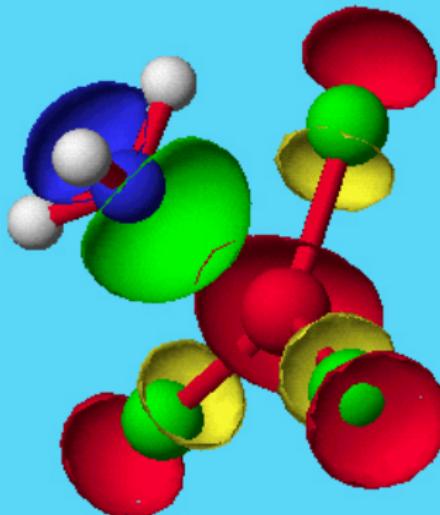
QM/MM 与酶化

学反应机理

QM/MM 计算软

件

Ammonia + Boron trichloride



HOMO

LUMO

酶在生物化学反应中的作用

化学键的本质
与生化反应动力学模拟

分子间相互作用
与化学键

蛋白质分子结构与活性位点

分子间相互作用与化学键

从力场到化学键

量子力学简介

能量量子化

Schrödinger 方程与量子力学的建立

量子力学与化学键的本质

分子轨道理论

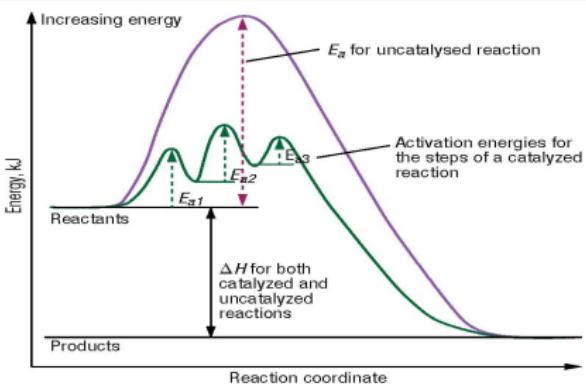
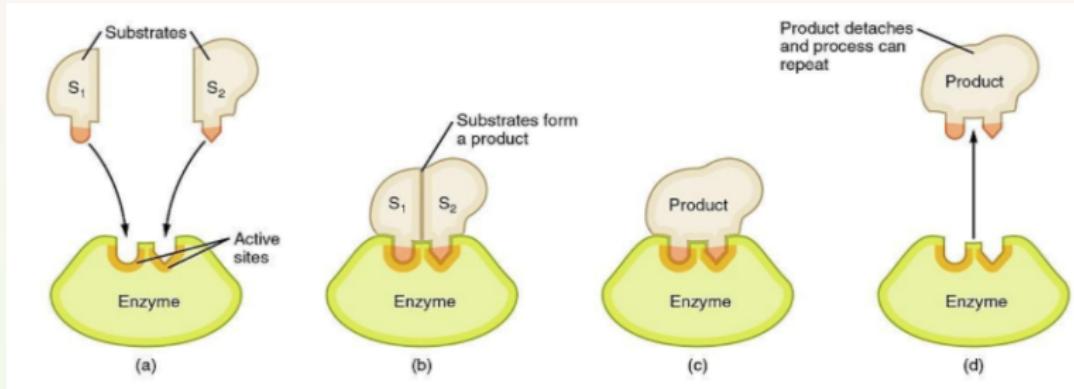
分子的稳定性与键级

化学键的本质

生物化学反应机理的模拟与常用软件

QM/MM 与酶化
学反应机理

QM/MM 计算软
件



酶的蛋白质结构特点

化学键的本质
与生化反应动力学模拟

分子间相互作用与化学键

蛋白质分子结构与活性位点

分子间相互作用与化学键

从力场到化学键

量子力学简介

能量量子化

Schrödinger 方程与量子力学的建立

量子力学与化学键的本质

分子轨道理论

分子的稳定性与键级

化学键的本质

生物化学反应机理的模拟与常用软件

QM/MM 与酶化
学反应机理

QM/MM 计算软
件

PROTEIN STRUCTURE

Scaffold to support and
position active site

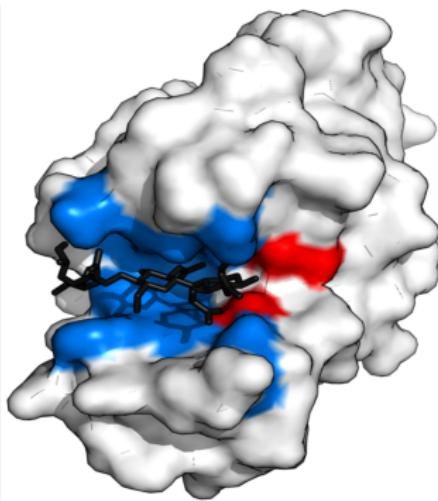
ACTIVE SITE

BINDING SITES

Bind and orient
substrate(s)

CATALYTIC SITE

Reduce chemical
activation energy



- **专一性、高效性:** 催化反应发生的位置
- **选择性:** 活性位点的结构
- **温和性:** 蛋白质的特点

酶化学的理论研究:QM/MM

化学键的本质
与生化反应动
力学模拟

分子间相互作
用与化学键

蛋白质分子结构与活
性位点

分子间相互作用与化
学键

从力场到化学键

量子力学简介

能量量子化

Schrödinger 方
程与量子力学的建立

量子力学与化
学键的本质

分子轨道理论

分子的稳定性与键级

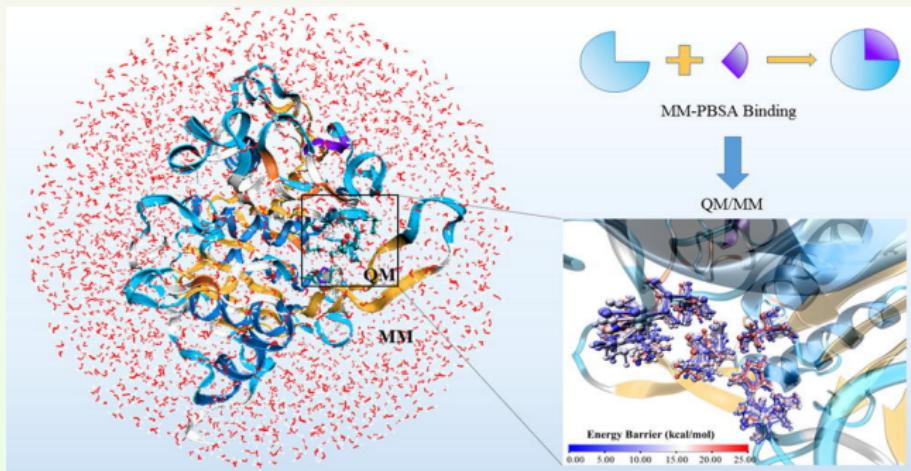
化学键的本质

生物化学反应
机理的模拟与
常用软件

QM/MM 与酶化
学反应机理

QM/MM 计算软
件

QM/MM 方法是一种分子模拟中结合量子力学 (QM) 的准确性以
及分子力学 (MM) 速度优势的计算方法¹



QM/MM 方法常用于研究溶液中的化学过程以及蛋白质体系

¹ QM/MM 最早由 Warshel 和 Levitt 在 1976 年提出。他们和 Martin Karplus 于 2013 年因为“发展了复杂化学体系的多尺度模型”而获得诺贝尔化学奖

酶化学的理论研究: QM/MM

化学键的本质
与生化反应动力学模拟

分子间相互作用与化学键

蛋白质分子结构与活性位点

分子间相互作用与化学键

从力场到化学键

量子力学简介

能量量子化

Schrödinger 方程与量子力学的建立

量子力学与化学键的本质

分子轨道理论

分子的稳定性与键级

化学键的本质

生物化学反应机理的模拟与常用软件

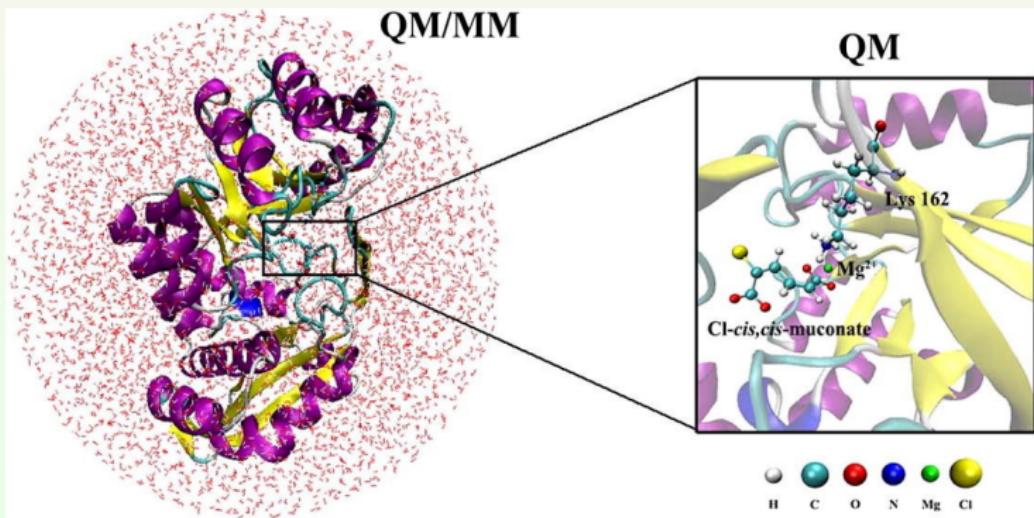
QM/MM 与酶化

学反应机理

QM/MM 计算软

QM/MM 将整个体系分为两个部分: 模型和环境

- 关键化学反应区域, 需要准确、高昂的 QM 方法进行计算
- 环境部分使用准确度较低, 但效率较高的 MM 方法进行模拟



QM/MM 的区域划分

化学键的本质
与生化反应动力学模拟

分子间相互作用与化学键

蛋白质分子结构与活性位点

分子间相互作用与化学键

从力场到化学键

量子力学简介

能量量子化

Schrödinger 方程与量子力学的建立

量子力学与化学键的本质

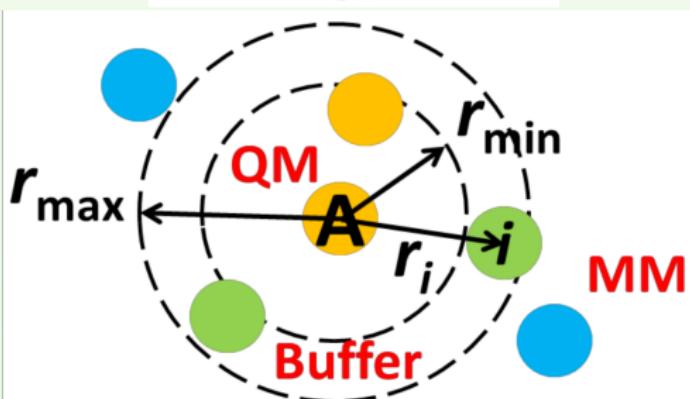
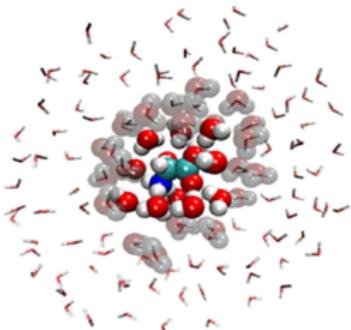
分子轨道理论

分子的稳定性与键级
化学键的本质

生物化学反应机理的模拟与
常用软件

QM/MM 与酶化
学反应机理

QM/MM 计算软
件



QM/MM 的计算策略

化学键的本质
与生化反应动力学模拟

分子间相互作用
与化学键

蛋白质分子结构与活性位点

分子间相互作用与化学键

从力场到化学键

量子力学简介

能量量子化

Schrödinger 方程与量子力学的建立

量子力学与化学键的本质

分子轨道理论

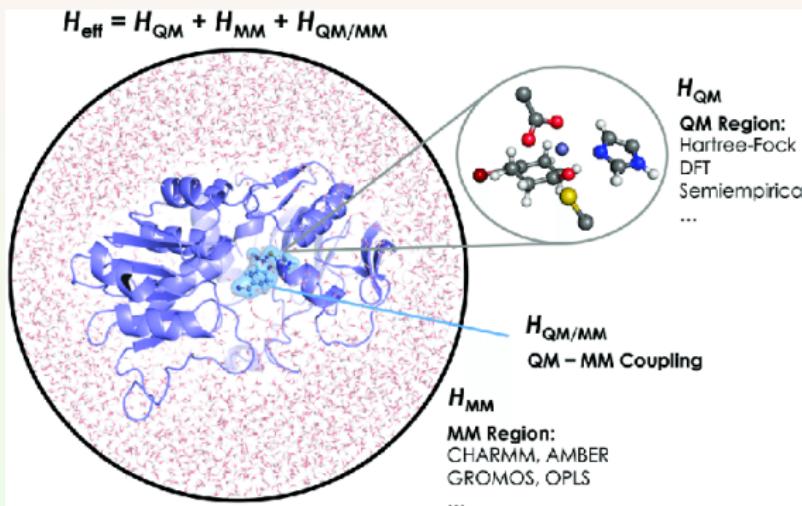
分子的稳定性与键级

化学键的本质

生物化学反应机理的模拟与常用软件

QM/MM 与酶化
学反应机理

QM/MM 计算软
件



体系整体能量：两部分的能量以及两部分相互作用的能量加和

$$E_{\text{QM/MM}} = E_{\text{QM},\text{model}} + E_{\text{MM},\text{env}} + E_{\text{QM/MM},\text{interaction}}$$

QM/MM 组合 Hamiltonian(H) 是模型和环境之间的相互作用，通常包括

- 与 QM/MM 边界一分为二的共价键的成键作用 (即拉伸、弯曲和扭转的贡献)
- 非键作用 (即 van der Waals (vdW) 和静电相互作用)

QM/MM 的特点

化学键的本质
与生化反应动力学模拟

分子间相互作用与化学键

蛋白质分子结构与活性位点

分子间相互作用与化学键

从力场到化学键

量子力学简介

能量量子化

Schrödinger 方程与量子力学的建立

量子力学与化学键的本质

分子轨道理论

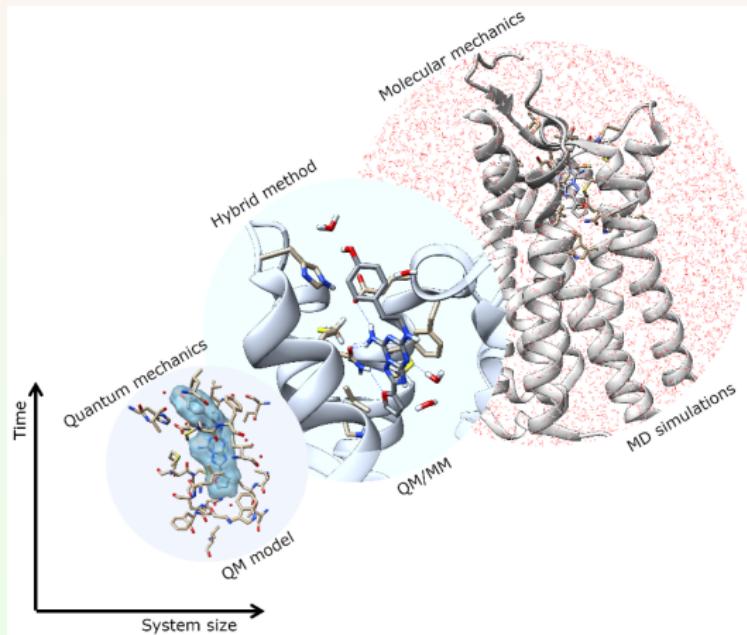
分子的稳定性与键级

化学键的本质

生物化学反应机理的模拟与常用软件

QM/MM 与酶化
学反应机理

QM/MM 计算软
件



- QM/MM 方法的**优点**: 能处理复杂的大分子体系
使原本 QM 方法算不动的体系变得可能计算

QM/MM 的特点

化学键的本质
与生化反应动力学模拟

分子间相互作用与化学键

蛋白质分子结构与活性位点

分子间相互作用与化学键

从力场到化学键

量子力学简介

能量量子化

Schrödinger 方程与量子力学的建立

量子力学与化学键的本质

分子轨道理论

分子的稳定性与键级

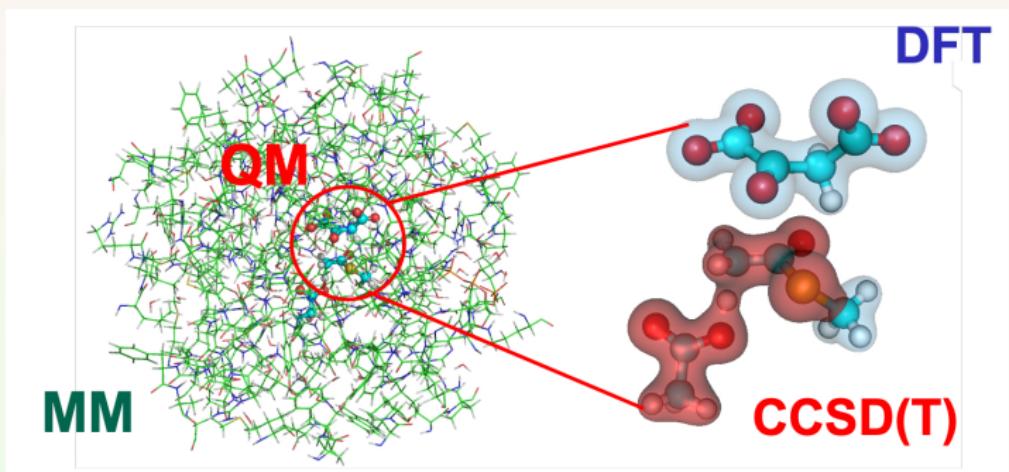
化学键的本质

生物化学反应机理的模拟与常用软件

QM/MM 与酶化

学反应机理

QM/MM 计算软



QM/MM 方法的缺点:

- 1** 不同计算水平的能量进行简单加和会造成较大的误差
需要计算 S-Value 来评价误差是否可以接受
- 2** 需要增补力场参数，参数的来源常常不易获得，甚至需要自行拟合
- 3** 计算耗时并不短

酶催化的反应动力学过程

化学键的本质
与生化反应动
力学模拟

分子间相互作
用与化学键

蛋白质分子结构与活
性位点

分子间相互作用与化
学键

从力场到化学键

量子力学简介

能量量子化

Schrödinger 方
程与量子力学的建立

量子力学与化
学键的本质

分子轨道理论

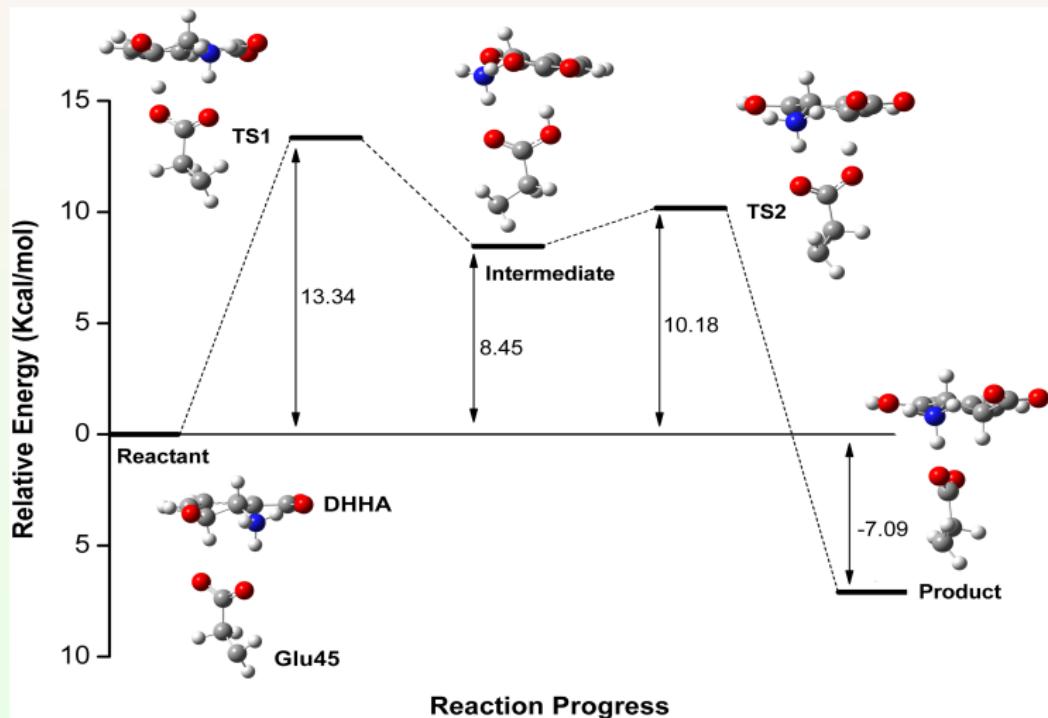
分子的稳定性与键级

化学键的本质

生物化学反应
机理的模拟与
常用软件

QM/MM 与酶化
学反应机理

QM/MM 计算软
件



酶催化的反应动力学过程

化学键的本质
与生化反应动
力学模拟

分子间相互作
用与化学键

蛋白质分子结构与活
性位点

分子间相互作用与化
学键

从力场到化学键

量子力学简介

能量量子化

Schrödinger 方
程与量子力学的建立

量子力学与化
学键的本质

分子轨道理论

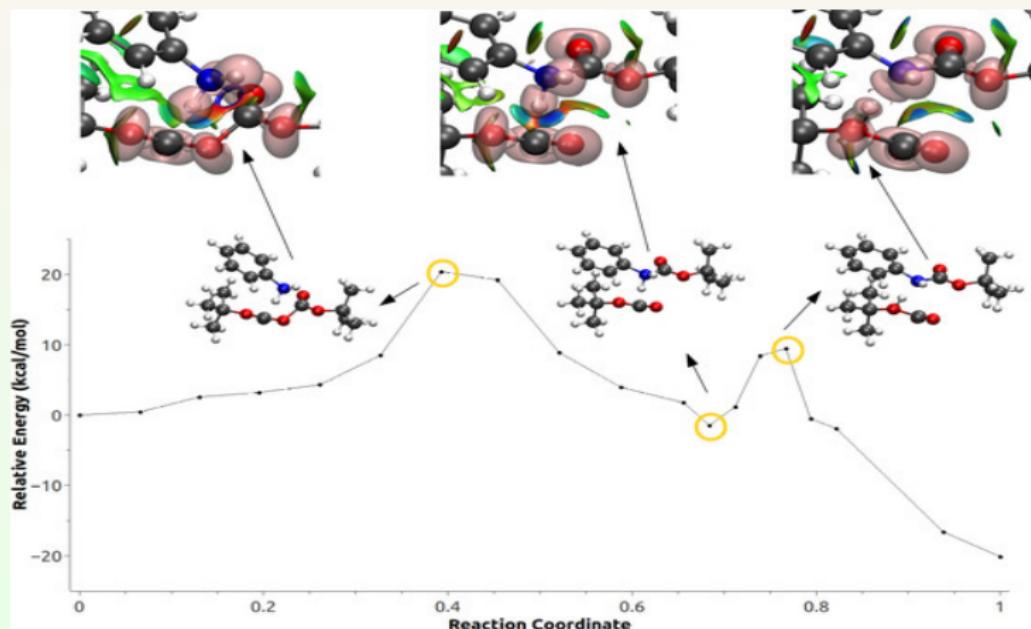
分子的稳定性与键级

化学键的本质

生物化学反应
机理的模拟与
常用软件

QM/MM 与酶化
学反应机理

QM/MM 计算软
件



QM/MM 计算建模与软件

化学键的本质
与生化反应动
力学模拟

分子间相互作
用与化学键

蛋白质分子结构与活
性位点

分子间相互作用与化
学键

从力场到化学键

量子力学简介

能量量子化

Schrödinger 方
程与量子力学的建立

量子力学与化
学键的本质

分子轨道理论

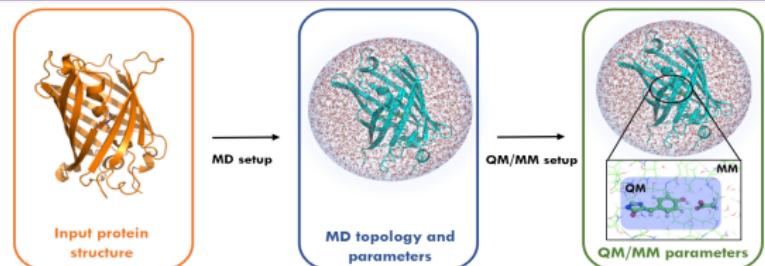
分子的稳定性与键级

化学键的本质

生物化学反
应机理的模拟与
常用软件

QM/MM 与酶化
学反应机理

QM/MM 计算软
件



	QM/MM features			HPC features	
	Electrostatic embedding	Shell model embedded cluster calculations	Multiple state interface	Directly linked interface	Task-farming parallelization (directly linked)
QM codes					
GAMESS-UK	X	X		X	X
NWChem	X	X		X	
FHI-AIMS ¹	X	X		X	
DALTON	X			X	
LS-DALTON ¹	X			X	X
DMol3	X				
TURBOMOLE	X				
ORCA	X				
GAMESS (US)					
Q-Chem	X				
Gaussian ²	X		X		
Molpro	X		X		
MNDO	X		X		
MOPAC	X			X	
MM codes					
DL_POLY 2 ³	X			X	X
GULP	X	X		X	X
GROMOS	X ⁴				
CHARMM	X ⁴				

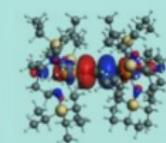
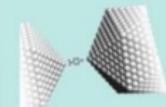
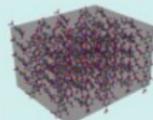
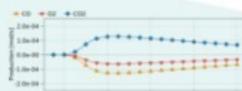
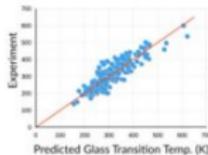
¹Scheduled for release in ChemShell 6.

²Not maintained by Daresbury Laboratory due to licensing restrictions.

³Internal module with integrated support for CHARMM and AMBER force fields.

⁴Possible but there is no automatic deletion of duplicate FF terms and so the user is responsible for providing a suitable topology.

QM/MM 计算软件



Fluid Thermodynamics

COSMO-RS
 COSMO-SAC
 UNIFAC

Kinetics

Kinetic Monte Carlo
 Microkinetics

Force Fields

ReaxFF, GFN-FF
 Machine Learning Potentials
 Apple & P

QM/MM

FDE, Hybrid Engine

Tight binding

GFN-xTB, DFTB

Periodic DFT

BAND, Quantum Espresso

Molecular DFT

ADF

化学键的本质
 与生化反应动
 力学模拟

分子间相互作
 用与化学键

蛋白质分子结构与活
 性位点

分子间相互作用与化
 学键

从力场到化学键

量子力学简介

能量量子化

Schrödinger 方
 程与量子力学的建立

量子力学与化
 学键的本质

分子轨道理论

分子的稳定性与键级

化学键的本质

生物化学反应
 机理的模拟与
 常用软件

QM/MM 与酶化
 学反应机理

QM/MM 计算软
 件

QM/MM 计算软件分类

化学键的本质
与生化反应动力学模拟

分子间相互作用与化学键

蛋白质分子结构与活性位点

分子间相互作用与化学键

从力场到化学键

量子力学简介

能量量子化

Schrödinger 方程与量子力学的建立

量子力学与化学键的本质

分子轨道理论

分子的稳定性与键级

化学键的本质

生物化学反应机理的模拟与常用软件

QM/MM 与酶化
学反应机理

QM/MM 计算软
件

按研究对象

小分子高精度计算

Molcas, Molpro, Q-chem, NW chem, Newton-X等

几十到几百原子的中等计算

Gaussian, Q-chem, Nwchem, Dmol3, GAMESS等

周期性体系计算

VASP, CASTEP, Crystal, ADF, WIEN2k等

生物蛋白质等体系计算

Amber, Gromacs, CHARMM, Lammmps, DL-poly等

QM/MM 计算软件分类

化学键的本质
与生化反应动力学模拟

分子间相互作用与化学键

蛋白质分子结构与活性位点

分子间相互作用与化学键

从力场到化学键

量子力学简介

能量量子化

Schrödinger 方程与量子力学的建立

量子力学与化学键的本质

分子轨道理论

分子的稳定性与键级

化学键的本质

生物化学反应机理的模拟与常用软件

QM/MM 与酶化
学反应机理

QM/MM 计算软
件

按计算方法

基于从头算方法(ab initio)

Gaussian, Molcas, Molpro, TURBOMOLE, Nwchem, Q-chem, Dalton, Gamess等

基于半经验方法(semi-empirical)

MOPAC, Zindo-MN, HyperChem, AMPAC等

密度泛函理论(DFT)

VASP, MS, Crystal, ADF, Gaussian等

分子/量子力学

Amber, Gromacs, CHARMM, Lammmps, DL-poly等

QM/MM 计算流程

化学键的本质
与生化反应动力学模拟

分子间相互作用与化学键

蛋白质分子结构与活性位点

分子间相互作用与化学键

从力场到化学键

量子力学简介

能量量子化

Schrödinger 方程与量子力学的建立

量子力学与化学键的本质

分子轨道理论

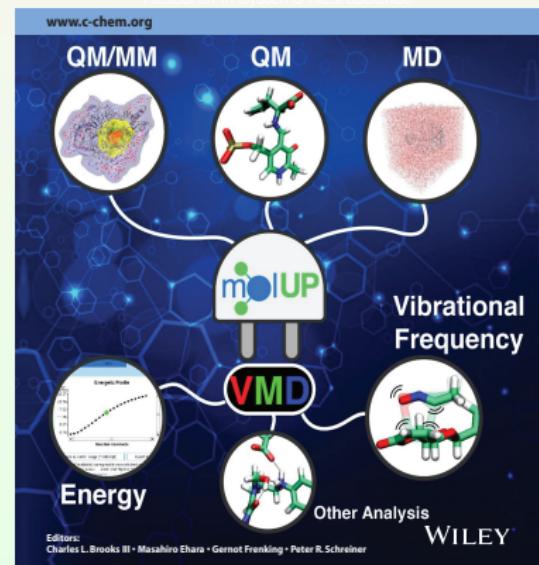
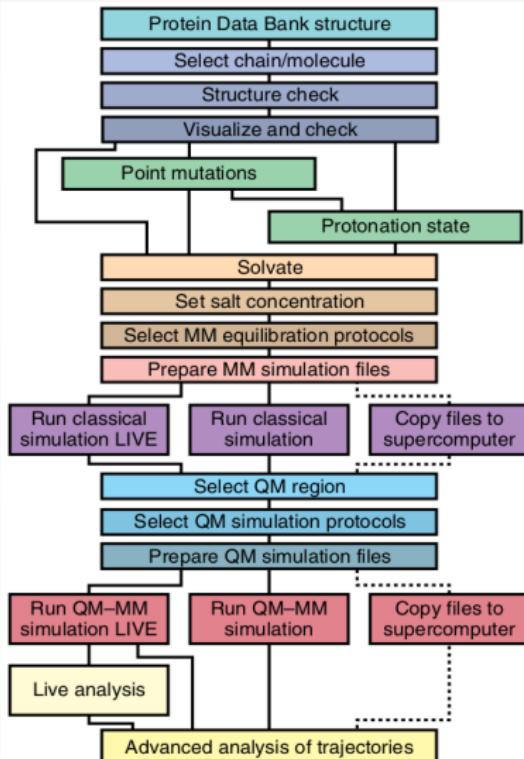
分子的稳定性与键级

化学键的本质

生物化学反应机理的模拟与常用软件

QM/MM 与酶化
学反应机理

QM/MM 计算软
件



主要参考文献

化学键的本质
与生化反应动
力学模拟

分子间相互作
用与化学键
蛋白质分子结构与活
性位点

分子间相互作用与化
学键
从力场到化学键

量子力学简介
能量量子化

Schrödinger 方
程与量子力学的建立

量子力学与化
学键的本质

分子轨道理论
分子的稳定性与键级
化学键的本质

生物化学反应
机理的模拟与
常用软件

QM/MM 与酶化
学反应机理

QM/MM 计算软
件

- [1] A. R. Leach. *Molecular Modelling: Principles and Applications (2nd Edition)* (Pearson Education, Harlow, 2001)
- [2] J. M. Goodman. *Chemical applications of molecular modeling* (The royal society of chemistry, Cambridge, 1998)
- [3] J. M. Thijssen. *Computational Physics (2nd Edition)* (Cambridge University Press, Cambridge, England, 2007)
- [4] 陈敏伯, 计算化学——从理论化学到分子模拟 科学出版社, 北京, 2009
- [5] 曾谨言, 量子力学 (第四版) 科学出版社, 北京, 2007
- [6] 徐光宪、黎乐民、王德民, 量子化学——基本原理和从头计算法 (上、中) 科学出版社, 北京, 1980

生命科学的研究思想: 分化.vS. 整合

化学键的本质
与生化反应动力学模拟

分子间相互作用与化学键
蛋白质分子结构与活性位点

分子间相互作用与化学键
从力场到化学键

量子力学简介
能量量子化
Schrödinger 方程与量子力学的建立

量子力学与化学键的本质
分子轨道理论

分子的稳定性与键级
化学键的本质

生物化学反应机理的模拟与常用软件

QM/MM 与酶化学反应机理
QM/MM 计算软件

生理学家刘曾复教授²认为 *

- 应该重视系统科学的思想和方法
注意**生命体机能的整合与调节**
- 生理学中的整合 (intergration) 类比集成电路
对“控制-反馈”过程的研究, **要有整体意识**
- 生理学研究重视整合、调节, 应该有新的数学为生理学服务
大数据 (BD) 支持的机器学习 (ML)、人工智能 (AI) 等技术
日趋成熟, **为生命科学研究提供了新的技术手段**



* 根据

杜金香 主编 《生理说苑——刘曾复论文选编及其他》 首都医科大学 (内部刊印) (2002)

刘曾复 著、娄悦 编 《刘曾复京剧文存》 学苑出版社 (北京) (2013) 附录“刘曾复访谈”部分相关内容

整理

² 刘曾复教授 (1914-2012), 我国老一辈著名生理学家, 曾任北京医学院教授, 北京第二医学院 (首都医科大学前身) 创始人之一。刘曾复教授的主要研究方向是电生理学、整合生理学。

化学键的本质
与生化反应动
力学模拟

分子间相互作
用与化学键

蛋白质分子结构与活
性位点

分子间相互作用与化
学键

从力场到化学键

量子力学简介

能量量子化

Schrödinger 方
程与量子力学的建立

量子力学与化
学键的本质

分子轨道理论

分子的稳定性与键级

化学键的本质

生物化学反应
机理的模拟与
常用软件

QM/MM 与酶化
学反应机理

QM/MM 计算软
件

谢谢大家！