

## <<生物燃料的计算模拟>>

### 图书基本信息

书名：<<生物燃料的计算模拟>>

13位ISBN编号：9787122146885

10位ISBN编号：712214688X

出版时间：2012-1

出版时间：化学工业出版社

作者：[美]M.R.尼姆勒斯（Mark R.Nimlos）、M.F.克劳利（Michael F.Crowley）编，王禄山 等译

页数：235

字数：404000

版权说明：本站所提供下载的PDF图书仅提供预览和简介，请支持正版图书。

更多资源请访问：<http://www.tushu007.com>

## &lt;&lt;生物燃料的计算模拟&gt;&gt;

## 前言

进入21世纪,随着世界经济的快速发展,石油等关键矿产资源将在本世纪中后期逐步接近枯竭。同时,化石燃料的燃烧导致二氧化碳排放量不断增加,造成全球气候变暖。能源、资源、环境问题已经成为制约新世纪社会经济可持续发展的主要瓶颈,引起了人们的广泛关注。现有的工业发展模式已经难以为继,开发新的可持续的绿色替代资源已成为世界各国的首要紧迫任务。

我国正处于工业化中后期与城镇化加速发展的阶段,能源与环境问题更为突出,特别是我国石油进口依存度已超过了50%,关系到国家的经济安全;而农耕方式向着机耕方式的快速转变,使得农作物秸秆游离于农业循环之外,常常就地焚烧,造成严重的环境污染。

因此,解决能源紧缺与资源浪费之间的矛盾,充分高效利用生物质资源进行生物炼制,对于我国这样一个人口众多、能源和资源紧张的国家来说,具有特别重要的战略意义和现实意义。

植物细胞壁在长期的自然进化中形成了木质纤维素这样复杂的化学成分和结构,成为其抗微生物和酶分子攻击的天然屏障,使得生物质难以被降解,现在称之为“生物质抗降解屏障”(参阅《生物质抗降解屏障——解构植物细胞壁产生物能》,化学工业出版社,2010)。

而作为碳循环主要降解者的微生物,在长期进化过程中形成了高效“纤维素降解的超分子机器——纤维小体”(同名图书由化学工业出版社出版,2011)或者复杂的木质纤维素酶降解酶系统(参阅《木质纤维素降解酶与生物炼制》,化学工业出版社,2011),可以将生物质转化为相应的化工原料或“生物燃料”(同名图书由化学工业出版社出版,2009)。

然而,现在木质纤维素的生物转化工艺多半还不经济,主要原因是相关研究还不深入,生物转化的相关工艺还是基于经验,未将分析推进至生物大分子相互作用的纳米水平,未全面引入计算模拟的方法与策略。

因此,新一代生物炼制技术的开发与设计,须在分子/原子水平上认识生物大分子的相互作用及分子动态行为,研究复杂生物质结构与复杂酶系或复杂超分子机器之间的关系,基于计算模拟的精确预测与分析,才能实现生物燃料和化学品工艺的优化与提升,才能推动生物炼制工业的快速发展。

本书由美国再生能源国家实验室M.R.Nimlos与M.F.Crowley博士主编,针对木质纤维素生物转化与热化学转化过程的一系列问题进行系统地计算模拟分析,在原子分子水平上认识生物质转化过程的分子动态行为及微观动态过程。

主要研究包括:木质纤维素超分子结构(详细介绍纤维素晶体的超分子结构模拟、木聚糖水解过程模拟、木质素与纤维素形成的复杂结构等),纤维素酶超分子结构(纤维素结合结构域、催化结构域、连接肽、对接模块与粘连模块及纤维小体的计算模拟),以及热化学等过程模拟及其计算模拟相关方法的研究进展。

书中研究内容翔实,可操作性强。

由于相关研究领域进展很快,因此本书增加“后记”一章,列出2011年至今年相关研究领域最新方法与最新进展。

山东大学微生物技术国家重点实验室长期从事纤维素降解微生物学、纤维素酶学及降解机理、生物质转化等相关研究,在纤维素降解、转化的基础和技术研究领域取得了备受国内外同行关注的研究成果,最近出版了一系列相关著作/译著,本书是系列图书中的第五本,侧重于计算模拟等新方法、新技术、新思路。

相关方法与技术的快速发展与推广将为新酶(系)的催化机理研究、理性改造策略选择、预处理底物结构及变化,以及糖苷水解酶系重构等开拓全新的视角,为新机理的提出、新工艺的形成奠定理论基础,将会促进微生物对纤维素生物质利用和转化过程的明显提升。

全书由王禄山、耿存亮、段晓云等翻译,由山东大学晶体材料研究所赵显教授、新加坡南洋理工大学生命学院的慕宇光副教授、山东大学化学与化工学院张冬菊教授校改。

由于该专著研究领域涵盖计算化学、计算生物学、生物质热化学、计算流体动力学等专业知识,翻译难度较大。

## <<生物燃料的计算模拟>>

受限于知识水平，翻译中难免会出现一些纰漏、不足或者不准确的地方，非常期望得到专家与读者的批评指正。

在翻译过程中得到了山东大学微生物技术国家重点实验室的高培基教授、曲音波教授、陈冠军教授的关心和帮助。

本书的出版得到了国家重点基础研究发展计划（2011CB707401）、国家自然科学基金（31070063，31170071）、山东省国际科技合作项目计划（鲁科合字〔2011〕176号第6项）的资助，在此一并表示衷心的感谢。

王禄山2012年8月

## <<生物燃料的计算模拟>>

### 内容概要

本书由美国再生能源国家实验室M．R．Nimlos与M．F．Crowley博士组织编写，针对木质纤维素生物转化与热化学转化过程的一系列问题进行系统的计算模拟分析，在原子分子水平上认识生物质转化过程的分子动态行为及微观动态过程。

主要包括：木质纤维素超分子结构(详细介绍纤维素晶体的超分子结构模拟、木聚糖水解过程模拟、木质素与纤维素形成的复杂结构等)，纤维素酶超分子结构(纤维素结合结构域、催化结构域、连接肽、对接模块与粘连模块及纤维小体的计算模拟)，以及热化学等过程模拟及其计算模拟相关方法的研究进展。

由于相关研究领域进展很快，因此本书增加“后记”部分，列出2011年以后相关研究领域最新方法与最新进展。

全书内容翔实，可操作性强，可供从事生物质开发利用与生物能源的研究人员参考阅读。

## <<生物燃料的计算模拟>>

### 书籍目录

#### 第1章 木糖水解的从头算分子动力学研究

##### 1.1 引言

##### 1.2 方法

##### 1.3 结果

##### 1.3.1 -1,4-木二糖的醚键在气相中的质子化以及与 -1,2-木二糖的对比

##### 1.3.2 水相中 -1,4-木二糖的酸催化水解

##### 1.4 结论

##### 1.5 致谢

##### 1.6 参考文献

#### 第2章 纤维素结构的模拟

##### 2.1 引言

##### 2.1.1 纤维素的应用及其相关背景

##### 2.1.2 天然纤维素晶体结构

##### 2.1.3 人造或不平常的纤维素晶体

##### 2.2 纤维二糖

##### 2.2.1 构象能量图

##### 2.2.2 纤维二糖晶体

##### 2.3 晶体结构的重构

##### 2.3.1 利用CSFF进行的1 模拟

##### 2.3.2 斜状晶体及DP40晶体10 的模拟

##### 2.4 纤维素纤丝的扭转及相关氢键

##### 2.5 结论

##### 2.6 方法

##### 2.7 致谢

##### 2.8 参考文献

#### 第3章 木质纤维素与纤维小体蛋白复合物的计算模拟

##### 3.1 引言

##### 3.2 木质纤维素生物质趋向真实的模拟

##### 3.2.1 木质素的分子力学力场

##### 3.2.2 木质纤维素模型的构建

##### 3.3 模建纤维小体：粘连模块?对接模块的相互作用

##### 3.3.1 基于晶体学结构分析 型粘连模块?对接模块的识别

##### 3.3.2 粘连模块?对接模块的解离自由能面

##### 3.4 总结与展望

##### 3.5 致谢

##### 3.6 参考文献

#### 第4章 纤维小体的多尺度建模

##### 4.1 引言

##### 4.2 纤维小体的定义与架构

##### 4.3 部分纤维小体模块的功能

##### 4.4 计算方法

##### 4.4.1 纤维小体组装的粗粒模型

##### 4.4.2 Cel9A的正则模式分析

##### 4.4.3 分子动力学模拟

##### 4.5 结论

## <<生物燃料的计算模拟>>

4.6 致谢

4.7 参考文献

第5章 植物细胞壁多糖介观尺度模建：研究CBM在纤维素表面的运动

5.1 引言

5.2 方法

5.2.1 碳水化合物的粗粒模型

5.2.2 纤维素的粗粒模型

5.2.3 CBM的粗粒模型

5.3 应用实例

5.3.1 CBM1在纤维素表面的运动

5.3.2 CBH 和CBH 的CBM的比较

5.3.3 CBM1的粗粒模型

5.4 结论

5.5 致谢

5.6 参考文献

第6章 纤维素酶分子的连接肽可储能吗

6.1 引言

6.1.1 纤维素酶系统

6.2 自由能计算

6.2.1 Ciccotti方法

6.2.2 伞状取样法

6.3 具体模拟过程

6.4 结果与讨论

6.5 结论

6.6 致谢

6.7 参考文献

第7章 纤维素酶活性位点及其与底物相互作用的QM/MM分析

7.1 引言

7.2 反应机理

7.3 纤维素酶活性位点的结构特征

7.4 糖环的扭曲形变

7.5 GH酶类从头算与分子动力学早期研究

7.6 当前模型的建立及模拟方法

7.7 Cel12A与Cel5A的QM/MM模拟

7.7.1 H. grisea的Cel12A催化的糖基化过程

7.7.2 B. agaradhaere Cel5A催化的去糖基化过程

7.8 结论

7.9 致谢

7.10 参考文献

第8章 分子模拟方法——常规实践与当前挑战

8.1 基本方法

8.1.1 动态与构象取样

8.1.2 相互作用势能函数

8.1.3 分子动力学模拟

8.1.4 蒙特卡洛取样

8.2 精确性要求

8.2.1 力场的精确性

## <<生物燃料的计算模拟>>

8.2.2 极化力场

8.2.3 QM/MM

8.3 速度要求

8.3.1 时间尺度

8.3.2 增强型取样技术

8.3.3 多尺度模拟

8.4 总结

8.5 参考文献

第9章 糖分子热化学的量子力学模拟

9.1 引言

9.2 量子力学方法

9.2.1 组合方法

9.2.2 平衡方程/等键反应

9.3 扩展到糖分子

9.4 初步结果

9.5 结论

9.6 致谢

9.7 参考文献

第10章 基于第一性原理与速率估计规则构建生物质热转化动力学模型

10.1 引言

10.2 计算方法

10.2.1 电子结构计算

10.2.2 热力学性质

10.2.3 速率表达式

10.3 结果

10.3.1 H原子与CH<sub>3</sub>自由基参与醇类脱氢反应的速率规则

10.3.2 醇类中气相脱水反应的速率规则

10.3.3 逆狄尔斯-阿尔德反应：生成小分子裂解产物的快速反应途径？

10.3.4 木质素模型化合物最初的分解步骤是什么？

10.4 讨论

10.5 总结

10.6 致谢

10.7 参考文献

第11章 生物质热化学过程中多尺度/多重物理场建模

11.1 生物质热化学转化面临的问题与尺度

11.2 生物质热转化中多重物理场的组成

11.2.1 生物质热化学过程中连续水平的计算流体动力学

11.2.2 晶格玻尔兹曼方法

11.2.3 蒙特卡洛动力学

11.2.4 多尺度/多重物理场耦合方法的应用实例

11.2.5 耦合多尺度/多重物理场成分的CWM方法

11.2.6 KMC与LBM耦合的时间积分

11.2.7 催化表面的分形投影

11.2.8 利用时间并行小波矩阵方法对时间加速

11.3 总结及展望

## <<生物燃料的计算模拟>>

### 11.4 参考文献

### 第12章 生物质气化与热裂解的计算流体动力学模型

#### 12.1 引言

##### 12.1.1 发展的现状与研究需求

#### 12.2 生物质热化学转化工艺及建模

##### 12.2.1 生物质气化的物理化学特性

##### 12.2.2 气固两相流体动力学

#### 12.3 CFD对于工艺设计与优化的贡献

##### 12.3.1 数值实验

##### 12.3.2 反应器放大

#### 12.4 从描述CFD到预测CFD

##### 12.4.1 现有模型

##### 12.4.2 模型的鉴定与认证

##### 12.4.3 计算资源与建模的挑战

#### 12.5 结论

#### 12.6 参考文献

### 第13章 利用路径取样寻找精确反应坐标的新方法

#### 13.1 引言

##### 13.1.1 自由能与反应坐标

##### 13.1.2 过渡态路径取样的中心思想

#### 13.2 路径取样算法

##### 13.2.1 势阱的定义

##### 13.2.2 寻找起始路径

##### 13.2.3 过渡态路径取样

##### 13.2.4 无的放矢法

##### 13.2.5 无的放矢法与其它方法的比较

#### 13.3 由路径取样数据寻找反应坐标

##### 13.3.1 pB与柱状图测试

##### 13.3.2 遗传神经网络方法

##### 13.3.3 极大似然法

##### 13.3.4 其它寻找反应坐标的方法

#### 13.4 通过已知反应坐标计算自由能

#### 13.5 由精确的反应坐标计算速率常数

##### 13.5.1 过渡态理论速率

##### 13.5.2 内摩擦的反应速率

##### 13.5.3 高摩擦限制下的反应速率

#### 13.6 总结及展望

#### 13.7 致谢

#### 13.8 参考文献



## <<生物燃料的计算模拟>>

### 版权说明

本站所提供下载的PDF图书仅提供预览和简介，请支持正版图书。

更多资源请访问:<http://www.tushu007.com>