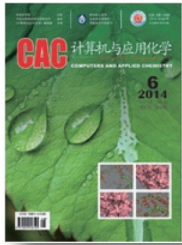


·国内期刊亮点·

反应分子动力学(ReaxFF MD) 模拟结果分析工具 VARxMD



反应分子动力学(ReaxFF MD)是一种很有潜力研究较大体系(>1000个原子)复杂化学反应的方法。国际上现有的ReaxFF MD模拟结果分析工具无法让用户了解所模拟的过程中发生的化学反应细节,对于规模小或简单的反应体系进行人工分析还可以接受,但对于原子规模达到~1000至~10000的大体系模拟,反应分析功能的缺乏,将使研究者对反应机理的分析陷入困境。

中国科学院过程工程研究所刘健等研发的反应分子动力学分析与可视化工具 VARxMD(Visualization and Analysis of ReaxFF Molecular Dynamics),是国际上第1个实现对ReaxFF MD模拟轨迹进行化学反应自动分析的工具。VARxMD是基于Qt/VTK和其他第三方库研发的跨平台图形用户界面程序,借助化学信息学的化学结构处理方法,对ReaxFF MD模拟结果轨迹中的原子、物种、成断键的分析,并结合数据可视化和分子片段结构可视化,实现对ReaxFF MD模拟结果的深度分析,可获得模拟过程中完整的化学反应信息。VARxMD已应用于煤热解和聚乙烯等复杂分子体系热解的化学反应机理探索,且VARxMD具有通用性,有望被应用于更多的体系。

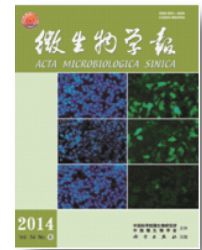
《计算机与应用化学》[2014-06-28]

推荐人:《计算机与应用化学》,王红

miR432*调控柯萨奇病毒A16型 在人横纹肌肉瘤细胞中的复制

中国疾病预防控制中心杨倬和中国科学院微生物研究所田波通过构建miRNAs靶基因筛选系统,在双荧光素酶报告体系的pMIR载体插入病毒基因,研究了miRNAs对柯萨奇病毒A16型(Coxsackievirus A16,CA16)在宿主细胞内复制的影响。该项研究结果首次报导miR432*在CA16病毒复制过程中的调控作用。通过研究发现CA16病毒5'-UTR基因可能是miRNAs的作用靶标。

研究表明,细胞内miR432*可以调控CA16在宿主细胞中的复制过程。miR432*可以促进病毒在RD细胞中的复制和表达,反之,miR432*inhibitor有抑制病毒复制的作用。研究CA16病毒与宿主miRNAs的相互作用机制为进一步阐明CA16病毒感染与复制机理奠定了基础。



《微生物学报》[2014-06-19]

推荐人:《微生物学报》,张晓丽

玉米中 OsAPO1 同源序列克隆 及其与产量相关性状的关系

OsAPO1是水稻中一个控制花序结构的基因,它具有多种功能,既能提高抗倒伏能力又能影响作物的产量。

华中农业大学

生命科学学院宋辉等研究了在玉米中克隆了OsAPO1的同源序列ZmAPO1-6和ZmAPO1-9。蛋白多序列比对发现,2个玉米序列和OsAPO1相似性均超过了83%而且都含有F-box结构域。组织特异性表达分析表明,ZmAPO1主要在孕穗期的雌穗中表达。利用近200个自交系与S型细胞质雄性不育系测交构建了关联分析群体,在2个环境下对这2个基因进行了关联分析。在ZmAPO1-6和ZmAPO1-9上分别检测到14和8个与产量相关性状显著关联的位点,其中前者检测到的显著位点主要与株高和茎粗有关,而后者检测到的位点主要与百粒重有关。初步的研究结果推测,OsAPO1在玉米中的2个同源基因可能与产量和产量相关性状有关,该同源基因的克隆和初步分析可



为进一步功能研究提供参考。

《中国科学:生命科学》[2014-08-18]

自组合法制备中空二氧化硅 纳米粒子减反射薄膜

浙江工业大学化学工程与材料学院孙志娟等以正硅酸乙酯(TEOS)为壳层材料,聚丙烯酸(PAA)为核材料,以传统的Stober水解法为基础制备得到结构规整的中空二氧化硅纳米粒子,并采用自组合法制备单层减反射薄膜和宽波段双层减反射薄膜。

研究人员主要研究中空二氧化硅纳米粒子的结构调控方法;自组合法次数和中空二氧化硅纳米粒子分散液的pH值对减反射薄膜透光率的影响规律,以及具有渐变折射率的双层减反射薄膜的制备。研究结果表明:通过调节PAA和TEOS的用量可精确调控中空二氧化硅纳米粒子的粒径和空腔体积分率,进而可精确调控减反射薄膜的厚度和折射率;通过酸洗工艺,将自组合法次数由10次减少为2次,简化了涂膜工艺条件,在最佳工艺条件下所制备的单层减反射薄膜在350~800 nm波长范



围内可显著提高玻璃的透光率,在最佳波长($\lambda=520$ nm)处将玻璃的透光率由91.6%提高至98.1%;双层减反射薄膜可在更宽的波段范围内提高基材的透光率。

《无机材料学报》[2014-09-20]

云杉体细胞胚的干化处理 可促进萌发

中国林业科学研究院林业研究所张建伟等针对云杉体细胞胚萌发率极低和萌发质量不高的问题,以高同步化体细胞胚为材料,对干化方式、干化时间和干化普遍性等影响干化处理的因素进行探讨,并建立基于形态和颜色识别的云杉体细胞胚的干化标记。

结果表明:采用“滤纸容器法”的干化方式更适用于云杉体细胞胚的干化处理;干化处理2周后能够获得最高的萌发率;本试验提供的干化处理方案对萌发促进作用具有普遍的适用性;以健壮绿色子叶、胚轴及红色胚根为标记的体细胞胚能够普遍获得高的萌发率和较好的萌发质量。

《林业科学》[2014-07-25]

(编辑 祝叶华)

