**分子动力学模拟项目信息登记表**

|  |
| --- |
| **\*客户信息** |
| 单位名称：  |
| 单位地址:  |
| 联系人姓名： |
| 联系人电话： |
| 联系人邮箱： |
| **\*模拟基本信息** |
| \*项目需求描述 |  |
| \*结构信息 | [ ] 纯天然氨基酸 [ ] 含非天然氨基酸 [ ] 非生物类分子 |
| \*项目类型 | [ ] 天然氨基酸基础模拟 [ ] 含非天然氨基酸模拟 [ ] 含膜模拟[ ] 自组装模拟 [ ] 拉伸动力学模拟 [ ] 粗粒化模拟[ ] 恒定pH模拟 [ ] 伞形采样 [ ] 自由能微扰[ ] 其它模拟\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ \_  |
| \*是否有初始结构 | [ ] 是\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ \_ [ ] 否：需要额外构建结构 |
| \*有无指定模拟软件 | [ ] 否 [ ] 是\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ \_ |
| \*是否需要平行计算 | [ ] 否 [ ] 是\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ \_ |
| \*是否需要对照组计算 | [ ] 否 [ ] 是\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ \_  |
| **\*模拟参数信息** |
| \*模拟时长 | [ ] 100ns [ ] 200ns [ ] 500ns [ ] 其它\_\_\_\_\_\_\_\_\_  |
| \*模拟温度 | [ ] 300K [ ] 310K [ ] 311K [ ] 其它\_\_\_\_\_\_\_\_\_  |
| \*特殊参数 | [ ] 无 [ ] 有\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_  |
| **项目需求** |
| \*项目预期结果 | [ ] 否 [ ] 是\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_  |
| \*有无参考文献 | [ ] 否 [ ] 是\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_  |
| \*项目周期要求 |  |
| **其他需求补充** |
|  |

注：

1. 拟做项目请勾选“×”；
2. 客户如有相关的项目资料请提供；
3. 客户如有其他项目需求，请直接补充。