**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。