قطب علمی
سیستم‌های پیچیده
و ماده چگال

سمینار هفتگي ماده چگال نرم

# Self-assembly of Supramolecular Chiral Structures: Molecular Dynamics Simulations

علیرضا دستان

انستیتو تحقیقاتی مواد و مهندسی، دانشگاه شفیلد هلم، شفیلد، انگلستان

یک ساختار فرامولکولی، توده ای پایدار از مولکولهاست که به وسیله پیوندهای غیرکووالانسی تشکیل شده است. فرآیند شکل گرفتن چنین ساختارهایی از واحدهای تشکیل دهنده آنها (مولکولها) به وسیله پیوندهای هیدروژنی، برهمکنش اکترواستاتیکی، ... تحت یک مجموعه شرایط منحصربه فرد بدون دخالت انسان، تشکیل خودبخودی نامیده می شود که هم در سیستم های زیستی و هم غیرزیستی قابل مشاهده است. در این تحقیق، روش دینامیک مولکولی برای شبیه سازی فرآیند تشکیل خودبخودی برخی ساختارهای فرامولکولی عمدتا مارپیچ به کار برده شده است که در آن پتانسیل گی-برن برای مدل کردن برهمکنش مولکول های دیسکی شکل با تمایل به جهت گیری رخ به رخ اعمال شده است.

در بخش اول، با در نظر گرفتن سیستم هایی که فقط شامل ذرات دیسکی اند، تشکیل خودبخودی فیبرهای مارپیچ مورد بررسی قرار می گیرد. مسیر سلسله-مراتبی شکل گرفتن این ساختارهای کشیده ی مارپیچ مطالعه شده و اثر ناهمگشتی در شکل و انرژی و نیز اندازه سیستم بر روی ساختار نهایی ارائه خواهد شد. در بخش دوم، با اضافه شدن ذرات کروی به شبیه سازی ها و در نظر گرفتن یک برهمکنش آمفیفیلیک بین ذرات دیسکی و کروی، امکان مطالعه گستره بسیار وسیعی از ساختارهای مارپیچ مهیج شامل دولایه ای مارپیچ، چندلایه ای مارپیچ، مارپیچ دوگانه، طناب های چند رشته ای و لوله ها (شکل 1) فراهم می گردد. نتایج نشان می دهد که برخی از مقیاس های طولی فرامولکولی در ساختارهای شکل یافته توسط پارامترهای مولکولی قابل کنترل است. نتایج این تحقیق می تواند به درک بهتر فرآیند پیچیده و سلسله-مراتبی تشکیل خودبخودی ساختارهای فرامولکولی مارپیچ کمک کند.

**زمان** :شنبه 97/2/8 ساعت 15:30
**مکان**: تالار جناب (آمفی تئاتر دانشکده فیزیک)