سمینار هفتگی ماده چگال نرم

شبیه سازی مولکولی فاز ساکن ستون های کروماتوگرافی

الهام آقایی

آزمایشگاه محاسباتی طراحی دارو، دانشکده شیمی، دانشگاه تهران

چکیده

علیرغم کاربرد گسترده‌ی روش‌های کروماتوگرافی در جداسازی مولکول‌های زیستی و سیستم‌های پیچیده، هنوز مکانیسم بازداری و نحوه‌ی برهمکنش بین حلال، فاز ساکن و حل شونده‌ها کاملا شناخته نشده است. به منظور توسعه و بهبود روش‌های کروماتوگرافی جهت جداسازی سیستم‌های پیچیده، فهم دقیق پدیده‌ی جذب بر روی سطح و چگونگی تقسیم آنالیت بین فاز ساکن و متحرک، امری حیاتی می‌باشد. همچنین پیدا کردن لیگاندی که بتواند برهمکنش اختصاصی با مولکول هدف برقرار کند و آن را به طور اختصاصی از سایر ترکیبات جدا کند نیز از اهمیت ویژه‌ای برخوردار می‌باشد. امروزه به جای استفاده از روش‌های پر هزینه و وقت گیر تجربی در طراحی ستون و تنظیم پارامترهای جداسازی و همچنین شناسایی مکانیسم برهمکنش، می توان از روش‌های کامپیوتری استفاده نمود. در این سمینار مطالعات و کارهای تحقیقاتی شبیه سازی مولکولی جذب بروی سطح گردآوری شده است. در ابتدا مدل‌های مختلف به کار رفته در روش‌های کروماتوگرافی شامل مدل‌های تمام اتم و یا دانه درشت توضیح داده شده است. سپس کارهای تحقیقاتی که بر روی جذب و رفتار بازداری مولکول‌های کوچک روی ستون صورت پذیرفته، گردآوری شده و در نهایت کاربرد شبیه‌سازی در طراحی ستون کروماتوگرافی برای جداسازی پروتئین‌ها ارائه شده است.

زمان: شنبه ۹۹/۱۲/۹ ساعت ۱۵:۳۰

مکان(کلاس مجازی آقای دکتر اجتهادی) :
https://vclass.ecourse.sharif.edu/ch/ejtehadi