



سمینار هفتگی ماده چگال نرم

محاسبه انرژی آزاد مؤثر با در نظر گرفتن عوامل ذاتی و خارجی در ابعاد نانو

چکیده

فرآیندهای زیستی با تغییر انرژی آزاد همراه هستند. در نتیجه، برای درک دقیق سازوکارهای مولکولی، محاسبه دقیق تفاوت انرژی آزاد نیاز است. روش‌های متفاوتی از سال ۱۹۳۵ میلادی برای محاسبه انرژی آزاد با استفاده از قوانین فیزیک کلاسیک و مکانیک آماری ارائه شده‌اند. هر چند بسیاری از شبیه‌سازی‌های زیستی از لحاظ کیفی مکمل خوبی برای نتایج آزمایشگاهی هستند، اما در مواردی هم چنان فاصله بین نتایج شبیه‌سازی با آزمایشگاهی وجود دارد. به دلیل پیچیدگی محیط‌های زیستی نیازمند نزدیکی بیشتر مدل‌سازی‌های مولکولی به طبیعت به منظور بهبود پیش‌بینی‌ها و یا تفسیر نتایج هستیم. عوامل ذاتی و خارجی (Intrinsic and Extrinsic Factors) از جمله قطبش حل شونده (پلاریزاسیون الکترونی) و اثرات پی اچ (pH) در انجام این محاسبات مؤثر هستند. نادیده گرفتن این عوامل، منجر به نتایج متفاوت برخی محاسبات کمی شبیه‌سازی (انرژی آزاد) با نتایج آزمایشگاهی می‌شود. انرژی آزاد را با در نظر گرفتن برخی از این عوامل، در برهمکنش نانو داروها و نانو ذرات با غشا و پروتئین‌های زیستی محاسبه کردیم. در برهمکنش با پروتئین‌ها، عوامل ذاتی مانند ساختار، گروه‌های عاملی و جهت‌گیری بارهای الکتریکی را مطالعه کرده‌ایم. در حالی که در برهمکنش با غشاهای زیستی، عوامل خارجی مانند اثر حلال را مدل‌سازی کرده‌ایم. راستی آزمایشی نتایج شبیه‌سازی را با استفاده از نتایج آزمایشگاهی انجام دادیم. در این سمینار، در خصوص نتایج این مطالعات صحبت خواهیم کرد.

Najla Hosseini

Sharif University of Technology,
Lund University

زمان: شنبه ۱۴۰۰/۸/۲۲ ساعت ۱۵:۳۰

مکان: کلاس مجازی دکتر اجتهادی

<https://vc.sharif.edu/ch/ejtehadi>