



## سمینار هفتگی ماده چگال نرم

### نقش غلظت کلسترول در غشاء سلولهای سرطانی و بهبود روش های محاسبه انرژی آزاد

#### چکیده

فرآیندهای زیستی با تغییر انرژی آزاد همراه هستند. در نتیجه، برای درک دقیق ساز و کارهای مولکولی، محاسبه دقیق تفاوت انرژی آزاد نیاز است. روش های متفاوتی از سال ۱۹۳۵ میلادی برای محاسبه انرژی آزاد با استفاده از قوانین فیزیک کلاسیک و مکانیک آماری ارائه شده اند. هر چند بسیاری از شبیه سازیهای زیستی از لحاظ کیفی مکمل خوبی برای نتایج آزمایشگاهی هستند؛ اما در مواردی هم چنان فاصله بین نتایج شبیه سازی با آزمایشگاهی وجود دارد. به دلیل پیچیدگی محیط های زیستی نیازمند نزدیکی بیشتر مدل سازی های مولکولی به طبیعت، به منظور بهبود پیش بینی ها و یا تفسیر نتایج هستیم. عوامل ذاتی و خارجی متفاوتی از جمله افزایش اجزاء لیپیدی (به عنوان مثال کلسترول) و قطبش حل شونده (پلاریزاسیون الکترونیکی) در انجام این محاسبات موثر هستند. نادیده گرفتن این عوامل، منجر به نتایج متفاوت برخی محاسبات کمی شبیه سازی (انرژی آزاد) با نتایج آزمایشگاهی می شود. هدف اصلی در این سمینار، ارائه روش هایی موثر برای در نظر گرفتن این عوامل در محاسبه انرژی آزاد به منظور نزدیک کردن نتایج کمی شبیه سازی به نتایج آزمایشگاهی سیستم های زیستی است.

**Najla Hosseini**

**Sharif University of Technology**

زمان: شنبه ۱۴۰۱/۲/۱۰ ساعت ۱۵:۳۰

مکان: کلاس مجازی دکتر اجتهادی

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