سمينار ماده چگال نرم

شبيه سازي پيچش پروتئين به روش ديناميک مولکولي گسسته

ليلي جاويدپور

چکيده

در اين جلسه راجع به روش شبيه سازي ديناميک مولکولي گسسته و چگونگي بکار گيري آن در مدل سازي پيچش پروتئين صحبت خواهد شد. ديناميک مولکولي گسسته، يک روش شبيه سازي است که در آن، پتانسيلهاي بين ذرات به صورت توابع پله ای تعريف مي شود و در نتيجه نمي توان نيروي بين ذرات را محا سبه کرد، زيرا در نقاط ناپيوستگي پتانسيل، نيرو بينهايت خواهد بود. در اين روش تا زماني که مقدار پتانسيل بين ذرات تغييرنکرده است، همه ذرات با سرعت ثابت در حرکت اند. هنگامي که پتانسيل بين دو ذره تغيير مي کند، سرعت هاي آنها نيز به نحو متناسبي تغيير خواهد کرد.در اين کار که فاز اول پروژه بوده و به انجام رسيده است، کار گروه ديگري در استفاده از اين روش براي شبيه سازي پلي آلانين بازسازي شده، تا در مراحل بعدي پروژه، رفتار پروتئين در نانوپور مورد بررسي قرار گيرد. در اين شبيه سازي، در دماهاي کمتر از دماي پيچش، پلي آلانين به حالت پايه خود که يک پيچه آلفا است مي رسد. نتايج به دست آمده با نتايج شبيه سازي گروهي که قبلاً اين کار را انجام داده اند تطابق خوبي دارد.

زمان : شنبه ۲۹ /۸٤/۵ ، ساعت ۱٦

مکان: آمفي تئاتر دانشکده فيزيک