سیویلیکا - ناشر تخصصی مقالات کنفرانس ها و ژورنال ها
گواهی ثبت مقاله در سیویلیکا
CIVILICA.com

عنوان مقاله:
اثر میدان نیروی قطبش پذیر درود بر شبیه سازی دینامیک مولکولی سیستم ترکیبی بیومولکول-نانومواد

محل انتشار:
هشتمین کنگره ملی تازه های مهندسی برق و کامپیوتر ایران (سال: 1400)

تعداد صفحات اصل مقاله: 7

نویسنده:
زینب محمدحسینی نوه - *استادیار، مرکز آموزش عالی کاشمر، کاشمر، خراسان رضوی، ایران*

خلاصه مقاله:
گنجاندن اثر قطبش القایی در شبیه سازی دینامیک مولکولی (MD) اتمی در مقیاس بزرگ یک چالش مهم درپیشرفت به سمت محاسبات با دقت بیشتر است. یکی از روش های محاسباتی کارآمد، مبتنی بر نوسانگر درود کلاسیکیاست که در آن یک ذره باردار کمکی توسط یک فنر به هر هسته اتمی متصل می شود. در این پژوهش شبیه سازی MDسیستم هیبریدی بیومولکول-نانومواد در محیط آبی و توسط میدان نیروی بار نقطه ای ثابت و به وسیله برنامه NAMDانجام شده است. به منظور بررسی اثر وجود قطبش القایی، شبیه سازی همان سیستم توسط میدان نیروی قطبش پذیردرود که در NAMD اجرا شده است، نیز انجام شده و نتایج مورد مقایسه قرار گرفته اند. نتایج به دست آمده با سایر پژوهش های انجام شده همخوانی دارد.

کلمات کلیدی:
شبیه سازی دینامیک مولکولی، میدان نیرو، مولکول های زیستی، میدان نیروی قطبش پذیر، نانومواد

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:
https://civilica.com/doc/1299167