

## عنوان مقاله:

نظریه و شبیه سازی گره پلیمر نیمه انعطاف پذیر محدود شده در کره و تاثیرات آن بر بسته بندی و خروج پلیمر

## محل انتشار:

سومین همایش بین المللی تحقیقات در علوم و فناوری نانو (سال: 1402)

تعداد صفحات اصل مقاله: 2

## نویسندگان:

فاطمه محرمی نژاد - پژوهشکده علوم و فناوری نانو، دانشگاه کاشان، کاشان.

سمانه قنبری کاشان

نرگس نیکوفرد

## خلاصه مقاله:

اسید دئوکسی ریبونوکلیک همان DNA ماده ارثی است که در سلول بدن انسان و تقریباً همه موجودات دیگر به طور فشرده و به شکل ژن ها و کروموزوم ها درآمده است که برای تکثیر یا رونویسی ابتدا باید از حالت فشرده در بیاید تا بتواند با آنزیم ها واکنش داشته باشد. در هنگام بسته بندی شدن DNA درون هسته سلول، امکان دارد گره های پیچیده تشکیل شود که به اصطلاحاً توپولوژیکی یا ساختاری DNA نیز بستگی دارد. برای بررسی دینامیک این زنجیره ی محدود می توان، یک رشته پلیمر نیمه انعطاف پذیر محصور شده در یک نانوکره را شبیه سازی و اثرات محدودیت را روی بسته بندی و خروج آن بررسی کرد و تاثیر طول و طول ایستایی رشته پلیمر (DNA) بر فراوانی گره را بیابیم. در این مطالعه، با استفاده از شبیه سازی دینامیک مولکولی عوامل اصلی جهت بسته بندی رشته پلیمر نیمه انعطاف پذیر به درون نانوکره از طریق یک نانو حفره بررسی می شود. ساختار نهایی پس از بسته بندی (تعداد و پیچیدگی گره) و سرعت بسته بندی از پارامترهای قابل توجه هستند. نتایج نشان می دهد با افزایش طول رشته پلیمر و طول ایستایی، گره های پیچیده ای تشکیل می شود که پیشنهاد می شود برای طول های بزرگتر پلیمر، شبیه سازی مجدد انجام شود.

## کلمات کلیدی:

پلیمر نیمه انعطاف پذیر، نانوکره، DNA، طول ایستایی، گره.

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/1692759>

