شبیه سازی دینامیک مولکولی سامانه‌های حاوی مایع یونی

چکیده

دامنه کاربردی سامانه‌های شامل مایعات یونی (Ionic Liquids) روز به روز در حال گسترش است و در این میان مطالعه‌ی محلول‌های آبی مایعات یونی هم از جنبه کاربردی و هم از جنبه بنیادی حائز اهمیت است. تعداد قابل توجهی از مایعات یونی می‌توانند آب را از محیط اطراف جذب کنند و در گذشته تصور می‌شد آب به عنوان ناخالصی مزاحم همراه با مایع یونی است. اما در حال حاضر، مخلوط نمودن مایع یونی با مقادیر دلخواه آب، روشی موثر و آسان برای گسترش دامنه‌ی کاربردی هر دوی آنها و راهکاری مناسب برای کنترل و تنظیم خواص مایع یونی است که می‌تواند هم گرانروی و هزینه استفاده از مایع یونی در فرایندها را کاهش دهد و هم در بهینه نمودن شرایط انجام برخی فرایندها نقش مهمی ایفا کند. طبیعت غیرسمی و زیست سازگار و خواص انحلالی مطلوب بسیاری از مایعات یونی سبب شده است تا از محلول آبی آنها به عنوان گزینه‌ای مناسب به عنوان محیط نگهداری زیست مولکول‌ها استفاده شود. در این راستا مطالعه‌ی محلول‌های آبی مایعات یونی با هدف درک تأثیر همزمان مایعات یونی و آب در پایداری ساختار پروتئین‌ها توجه زیادی را به خود جلب کرده است. به عنوان مثالی دیگر از گسترش کاربردهای زیستی محلول آبی مایعات یونی می‌توان به بررسی و ارزیابی فعالیت ضدباکتری محلول آبی برخی مایعات یونی در سال‌های اخیر اشاره نمود. افزایش مقاومت باکتری‌ها در برابر داروهای موجود، انگیزه‌ی جستجو و سنتز ترکیبات جدید دارویی با خواص ضدباکتری است. به نظر می‌رسد برخی مایعات یونی با توجه به تأثیر مخربی که بر غشای سلول باکتری می‌توانند داشته باشند، به عنوان جایگزین داروهای ضدباکتری قابلیت استفاده دارند. توجه به جزئیات مکانیسم‌های ممکن برهمکنش داروها با غشای سلولی در سطح اتمی-مولکولی می‌تواند نقش کلیدی در طراحی داروهای مناسب و بهبود ترکیب فرمولی آنها در پزشکی و داروسازی داشته باشد. از این رو شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی می‌تواند ابزاری کارآمد در مطالعه سامانه‌های زیستی در سطح مولکولی باشد. در این سخنرانی به برخی پژوهش‌های جدید صورت گرفته در این راستا در گروه شبیه سازی دینامیک مولکولی دانشکده شیمی دانشگاه تحصیلات تکمیلی علوم پایه زنجان، اشاره خواهد شد.